Fizički Fakultet

Fedor Herbut

KVANTNA MEHANIKA

za istraživače

Univerzitet u Beogradu, 1999.

PREDGOVOR

U razvoju svake nauke dođe vreme kada se kvantitet pretoči u novi kvalitet i dotična oblast, izgradjivana mukotrpnim induktivnim putem, staje na svoje noge i postaje deduktivna. Tada pitanja "kako su ljudi došli do ovog ili onog saznanja", koja su ranije uzbudjivala radoznalce, moraju da ustupe mesto pitanjima o logičkom statusu pojedinih zaključaka u sklopu deduktivnog zdanja dotične oblasti.

U ranijim udžbenicima je intuicija služila kao most za prenošenje znanja na čitaoce. On je varljiv i nepouzdan: koliko god da je čvrst i solidan sa onog kraja gde je pisac knjige, može biti sav trošan i izlomljen sa drugog kraja gde je čitalac. U deduktivnom prilazu, kakav je usvojen u ovom udžbeniku, polazi se od nekoliko osnovnih postavki ili postulata, koji imaju značenje osnovnih zakona mikrosveta, a ostalo se prepušta preciznim i moćnim algoritmima matematike. Unapred pripremljena, ona predstavlja pouzdan i siguran most za prenošenje znanja. Što se tiče intuicije, očekuje se da se stvara uporedo sa sticanjem znanja, jer se na saznanjima klasične fizike ionako nije mogla formirati.

Poželjno je da se matematički aparat kvantne mehanike (linearna algebra i elementi linearne analize) savlada pre same kvantne mehanike, kao što se i znanja klasične fizike grade na već položenim temeljima diferencijalnog i integralnog računa. Pošto u vreme pisanja udžbenika ovaj cilj nije bio u potpunosti postignut ni na istraživačkom smeru fizike PMF-a u Beogradu (a ovaj udžbenik je prvenstveno namenjen i prilagođen njemu), usput sam ubacivao matematičke podsetnike koji bez dokaza rezimiraju neko matematičko gradivo potrebno za asimilaciju kvantnomehaničkog štiva.

Kao što će čitalac videti, u udžbeniku se mnogo koristi "aritmetika" kvantne mehanike: ortogonalni zbir potprostora stanja ("sabiranje"; po fizičkom smislu povezano je sa mogućnostima rezultata merenja), razlaganje na ortogonalne potprostore ("oduzimanje"), tenzorsko množenje faktor prostora stanja ("množenje"; fizički znači spajanje podsistema u nadsistem) i najzad tenzorsko faktorisanje ("delenje"). U poređenju sa starijim udžbenicima, u kojima je pomenuta "aritmetika" manje uočljiva, ovaj udžbenik se na prvi pogled čini složenijim i nepristupačnijim. Ali, pošto se bez tih matematičkih pojmova u stvari ne može, lakše se usvajaju znanja uz njihovo eksplicitno korišćenje. Poznavalac kvantne mehanike se njima koristi samo implicitno. Stoga ih na kraju kursa treba zanemariti baš kao što i skele, nužne u fazi gradnje, postaju na kraju suvišne.

Teorija uglovnog momenta je izložena (na kraju prvog i na početku drugog dela) detaljnije nego što je uobičajeno da bi čitalac imao jedan važan i precizno urađen uzor na koji, po analogiji, može da nadoveže tretiranje bilo koje simetrije fizičkog sistema.

Zvezdicom neobeležene partije udžbenika polažu studenti istraživačkog smera fizike (teoretičari i eksperimentatori), a ceo udžbenik polažu poslediplomci smera teorijske fizike. Za razliku

od poznatog udžbenika kvantne mehanike A. Messiah-a, gde se gradivo izlaže na dva nivou u dva koncentrična kruga (na njega sam se najviše oslanjao u pisanju ovog dela), u ovom udžbeniku je celo gradivo izloženo na jednom jedinstvenom (istraživačkom) nivou (u jednom krugu). Zvezdicom označene partije daju više pojedinosti, dokaze, itd., ali ne i viši nivo sagledavanja materije.

Izlaganje je propraćeno računskim zadacima (bez datih rešenja), čiji je cilj da navedu čitaoca da aktivno usvaja gradivo. Oni ne mogu da zamene računske vežbe (na osnovu neke zbirke zadataka), koje su neophodne radi sticanja operativnog znanja bez kojeg samo teorijsko znanje kvantne mehanike nije dovoljno za istraživača.

Autor je unapred zahvalan za sve primedbe koje će mu dovoljno zainteresovani čitaoci pismeno ili usmeno dostaviti.

12. januara 1982.

prof. Fedor Herbut

Sadržaj

Glava 1

* IDEJNE OSNOVE KVANTNE MEHANIKE

1.1 Dva prosta i tipična kvantna eksperimenta

U ovom odeljku opisaćemo dva eksperimenta koji su veoma jednostavni, a ipak sadrže osnovne karakterne crte kvantnog ponašanja mikro-objekata. To su difrakcija kroz dva otvora i delimično odbijanje fotona na semireflektivnom ogledalu. U diskusiji baš ovih i sličnih eksperimenata bi veliki stvaraoci kvantne mehanike na svojim tzv. Solvay-skim sastancima (počev od 1927. svake treće godine u Bruxelles-u) vodili oštre diskusije i kroz borbu mišljenja oformljavali fiziku mikro-objekata. I nama će ovi eksperimenti poslužiti da u narednim glavama na njima baziramo osnovne ideje i osnovne zakonitosti kvantne mehanike.

1.1.1 Uvod

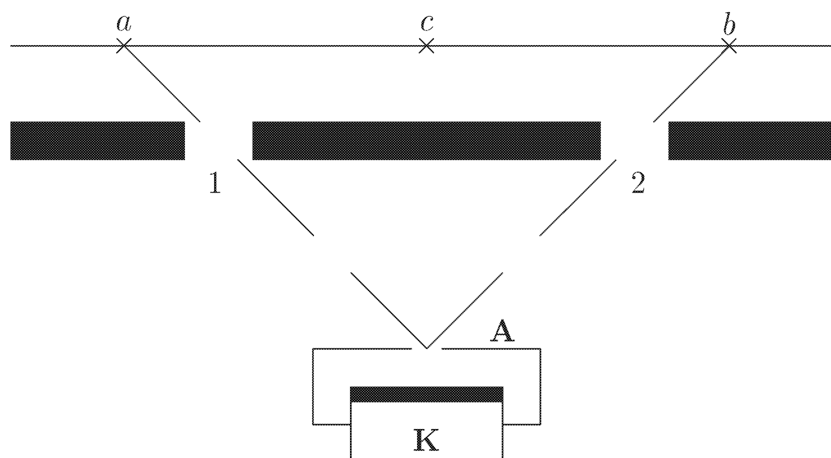
U klasičnoj talasnoj optici dobro je poznata difrakcija svetlosti kroz dva otvora. To je tzv. Young-ov eksperiment (objavljen 1802. godine), jedan od najprostijih primera interferencije. Sada ćemo opisati analogni eksperiment sa snopom čestica i to elektrona[1.1.1].

1.1.2 Eksperimentalni uređaj

Kao što je prikazano na Crtežu C 1.1, katodna žica K emituje elektrone, koji se ubrzavaju privučeni ka anodnoj ploči A. Tu prolaze kroz mali otvor, koji deluje kao tačkasti izvor elektronskog snopa. Elektroni zatim prolaze kroz otvore 1 i 2 u prvom zastoru i stižu na drugi zastor, gde se detektuju.

Pošto je cilj eksperimenta da se utvrdi gde padaju elektroni, zamislimo da se drugi zastor sastoji od sitnih brojača gusto zbijenih jedan do drugog i vezanih za električni uređaj koji razlikuje i beleži u kom brojaču se elektron detektuje. Otvor 1 kao i 2 može i da se zatvori.

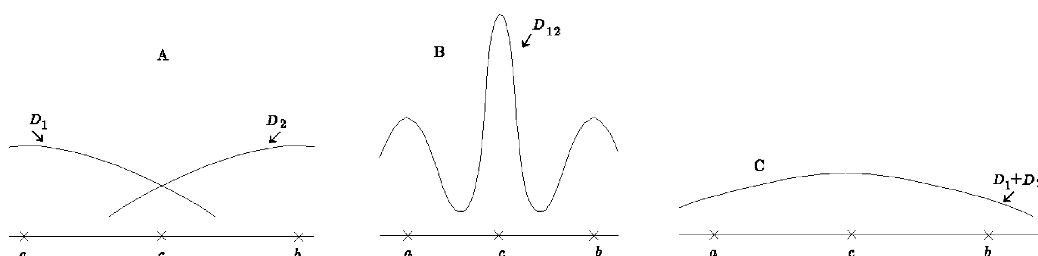
[1.1.1] Radi detaljnijeg upoznavanja sa jedno-fotonskim eksperimentom Young-a (koji je namenjen u pedagoške svrhe) videti: S. Parker, *American Journal of Physics*, **39** (1971) 420 i **40** (1972) 1003 i F. Herbut, *American Journal of Physics*, **60** (1992) 146.



Slika 1.1: **Young-ov eksperiment**. *K i A su katoda i anoda. Isprekidane crte prikazuju očekivane klasične putanje elektrona koji, prolazeći kroz otvor 1, odnosno 2, prvog zastora, padaju u tačku a, odnosno b, drugog zastora. Tačka c označava sredinu drugog zastora.*

1.1.3 Rezultati

Rezultate izvršenih eksperimenata prikazaćemo pomoću *distribucionih krivih* (videti Crtež C 1.2), čije ordinate izražavaju broj upadnih elektrona, a apscise označavaju mesto na drugom zastoru (duž linije kroz tačke a i b sa Crteža C 1.1). Naravno, krive se dobijaju interpolacijom iz diskretnih tačaka.



Slika 1.2: **Distribucione krive u Young-ovom eksperimentu**. *A. Kada se eksperiment vrši sa otvorom 1 otvorenim a otvorom 2 zatvorenim, dobija se distribuciona kriva D_1. U simetričnom eksperimentu (sa otvorom 1 zatvorenim a otvorom 2 otvorenim) dobija se distribuciona kriva D_2. B. Kada se eksperiment vrši sa oba otvora otvorena, dobija se $D_{1,2}$. C. Zbir krivih D_1 i D_2.*

1.1.4 Diskusija

Prirodno je da naše razmišljanje o eksperimentu koji smo upravo opisali započnemo sa pozicija klasične fizike: elektroni su čestice i zato očekujemo da svaki od njih ima svoju putanju. Ako

elektron stigne do drugog zastora, očekujemo da je prošao kroz otvor 1 ili kroz otvor 2 (ne, naravno, kroz oba). Distribucione krive D_1 i D_2 ne protivureče ovoj pretpostavci. (Rasturanje oko tačke a i b može se interpretirati kao rezultat sudara sa ivicom otvora.)

Najvažniji rezultat, kriva $D_{1,2}$, je u *oštroj suprotnosti* sa našim očekivanjem. Naime, u slučaju kada su oba otvora otvorena, naša pretpostavka nužno dovodi do distribucione krive $D_1 + D_2$ kao očekivanog rezultata. Drugi zastor ne razlikuje da li je elektron prošao kroz otvor 1 ili kroz otvor 2 i detektuje zbir svih ovih čestica.

Da bismo bolje sagledali koliko se $D_{1,2}$ razlikuje od $D_1 + D_2$, uočimo sledeća dva detalja:

a) Na sredini između tačaka a i c ordinata od $D_{1,2}$ ne samo da je manja nego odgovarajuća ordinata od $D_1 + D_2$, nego je čak osetno manja nego odgovarajuća ordinata od D_1. To bi, na osnovu naše pretpostavke o klasičnim trajektorijama, značilo da broj elektrona koji stižu u dotičnu tačku na drugom zastoru prolazeći kroz otvor 1 opadne (!) kada se otvori i otvor 2.

b) U tački c ordinata krive $D_{1,2}$ je više nego dva puta veća od ordinate krive $D_1 + D_2$. Znači, ako su oba otvora istovremeno otvorena u tačku c stiže mnogo više elektrona negoli što je ukupan broj elektrona koji prođu kroz otvor 1 (sa otvorom 2 zatvorenim) i elektrona koji prođu kroz otvor 2 (sa otvorom 1 zatvorenim)!

Ako se podsetimo na difrakcioni obrazac u pomenutom eksperimentu sa svetlošću (uporediti § 1.1.1), zapazićemo da se on kvalitativno podudara sa našom krivom $D_{1,2}$ (tamo jačina osvetljenosti odgovara našem broju upadnih elektrona).

Dakle, neizbežan je zaključak da elektroni kroz otvore prvog zastora prolaze kao talasi: ako su oba otvora na raspolaganju, onda prolaze kroz oba istovremeno, a na drugom zastoru nastaje *interferencija*. Na nekim mestima (kao u tački c) interferencija je konstruktivna (ili pozitivna), verovatnoća detektovanja elektrona se povećava; na drugim mestima (kao na sredini između a i c) interferencija je destruktivna (ili negativna), tj. verovatnoća padanja elektrona na to mesto se smanjuje.

1.1.5 Misaoni eksperiment

Iz klasične teorije difrakcije talasa kroz dva otvora poznato je da je difrakcioni obrazac kvalitativno jednak našem crtežu $D_{1,2}$ samo ako je rastojanje otvora 1 i 2 reda veličine talasne dužine difraktovanog talasa. Ako je rastojanje znatno veće, dobija se veći broj manje izraženih osvetljenih mesta između a i b; u ekstremnom slučaju mnogo osvetljenih i zamračenih mesta prelivaju se jedno u drugo — ispod moći razlaganja detektora — dobija se obrazac nalik na $D_1 + D_2$.

Ispostavlja se da je klasična talasna teorija (preko poznate de Broglie-eve jednačine $\lambda = \frac{h}{p}$) dobra aproksimacija za kvantitativno opisivanje prolaska elektrona kroz dva otvora. Talasna dužina elektrona je reda veličine 10^{-8}cm, a to je red veličine prečnika atoma! Zato je eksperiment koji smo opisali u ovom odeljku *misaoni eksperiment*, u stvari neostvariv u laboratoriji u opisanom vidu. Ali, veštim domišljanjima, dobijeni su savremeni realni (ne misaoni) eksperimenti difrakcije kroz dva otvora sa elektronima i sa neutronima[1.1.2].

[1.1.2] Videti: C. Jönsson, *American Journal of Physics*, **42** (1974) 4 i A. Zeilenger, R. Gähler, C. G. Schull, W. Treimer and W. Mampe, *Reviews of Modern Physics*, **60** (1998) 1067.

1.1.6 Diskretna detekcija

Iako je difrakcioni obrazac $D_{1,2}$ u osnovi isti u slučaju elektrona i u slučaju klasične svetlosti, rekli smo da klasična talasna teorija samo približno opisuje ovaj fenomen. Naime, klasična talasna optika predviđa apsorpciju talasne energije na drugom zastoru, a to je fenomen karakterisan *kontinualnošću* kako prostornog rasporeda (po drugom zastoru), tako i intenziteta upadne svetlosti. Drugim rečima, može se uzimati kontinualno sve slabiji izvor (sve do nulte jačine) i pri tome na svaku površinu drugog zastora pada neka svetlost; raspored je kao na krivoj $D_{1,2}$, ali veličine ordinata konformno (tj. kao množeni zajedničkim faktorom koji teži nuli) postaju sve manje.

Ovaj fenomen se u stvari *ne* opaža na opisani način ni kod svetlosti, jer se i svetlost detektuje uvek čestično, tj. u vidu fotona (kvanata svetlosti). Kada je drugi zastor velika foto-ploča, fotoni će izbijati elektrone u pojedinim atomima (zacrnjenje ploče) i to će se dešavati povremeno i mestimično, tj. sasvim *diskretno*. Kriva $D_{1,2}$ je interpolisana, kao što smo rekli, iz diskretnih ordinata. Naravno, potpuno analogno stoje stvari sa detekcijom elektrona u brojačima iz kojih se sastoji drugi zastor u gore opisanom eksperimentu.

Dakle, kako kod svetlosti tako i kod masenih čestica, izračivanje u izvoru i detekcija su čestične, diskretne pojave, a samo prostiranje je u oba slučaja talasna pojava, koja interferencijom dovodi do rasporeda padanja čestica na zastor.

1.1.7 Interferencija sa samim sobom

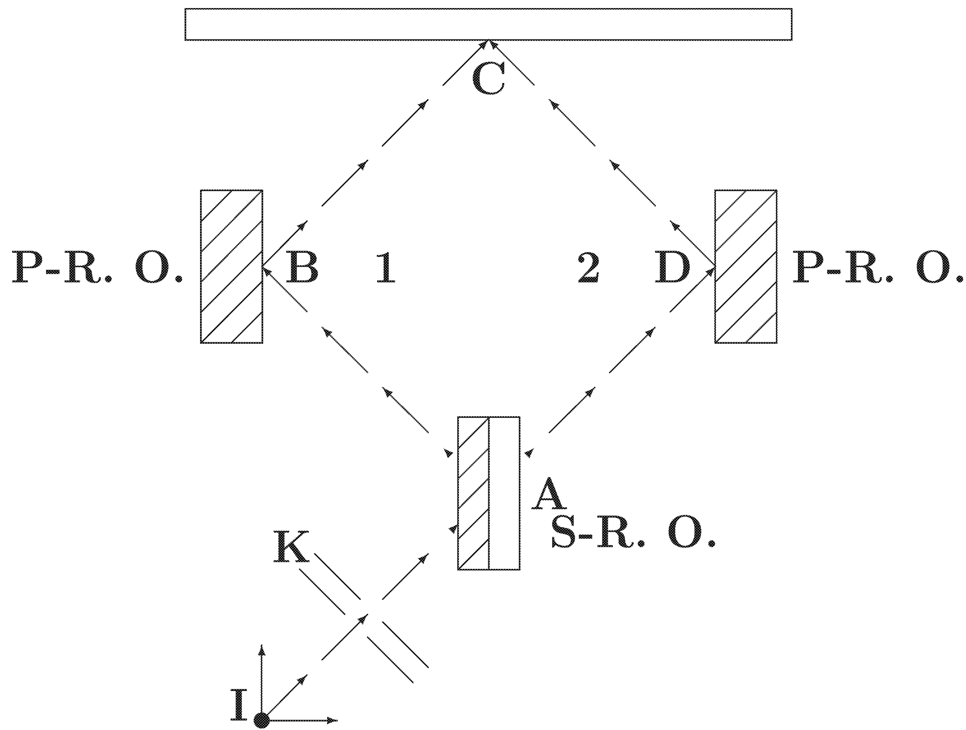
Da bi se otklonila česta iluzija da se pri interferenciji radi zapravo o nekoj interakciji ili nekakvom drugačijem uzajamnom uticaju istovremeno prisutnih čestica u snopu (fotona ili elektrona), zamislimo da je intenzitet izvora toliko mali da se izrači čestica, pa dugo ništa, pa opet jedna čestica (foton ili elektron). A u svrhu kompenziranja, produžimo vreme trajanja eksperimenta (eksponiranje drugog zastora) koliko god dugo je potrebno da se akumulira dovoljno velik broj upadnih čestica na pojedinim mestima na zastoru. Dobijaju se potpuno *isti* rezultati (Crtež C 1.2) kao sa intenzivnim snopom i kratkim eksponiranjem. Dakle, radi se o *interferenciji* fotona ili elektrona sa *samim sobom* kada prolazi istovremeno kroz otvor 1 i kroz otvor 2 na prvom zastoru[1.1.3].

1.1.8 Eksperiment sa semireflektivnim ogledalom

Sada ćemo opisati jedan drugi kvantni eksperiment koji je donekle analogan difrakciji kroz dva otvora, ali je nešto i različit. Ovaj eksperiment će biti pogodan za razmatranje principa neodređenosti u sledećem odeljku. Ovoga puta ćemo se ograničiti na fotone. (Njihovo kvantno ponašanje je isto kao kvantno ponašanje masenih čestica.) Ovo je realan eksperiment, mada prikazan pojednostavljeno.

Eksperimentalni uređaj prikazan je na Crtežu C 1.3. Optičke putanje 1 (tj. ABC) i 2 (tj. ADC) završavaju se u C, gde mogu da interferiraju. Ove dve putanje su očigledno analogoni pro-

[1.1.3] U vezi sa eksperimentom koji smo opisali preporučuje se kao detaljnije, a veoma slikovito i dramatično napisano štivo: volumen III u seriji *The Feynman Lectures on Physics*: R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, *Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, 1963), str. od 1-2 do 1-13.



Slika 1.3: **Eksperiment sa ogledalima**. *Izvor I zrači fotone, koji prolaze kroz kolimator K (dva paralelna otvora) kako bi se postigao paralelan snop. U tački A nalazi se semireflektivno ogledalo (S-R. O.; naziva se i poluposrebrenim ogledalom, senčenjem je simbolički prikazan sloj srebra), na kome se foton sa jednakom verovatnoćom reflektuje ka tački B ili prolazi ka tački D. U tačkama B i D nalazi se po jedno potpuno reflektivno ogledalo (P-R. O.), koje reflektuje svetlost ka tački C na zastoru.*

laska kroz otvor 1 odnosno kroz otvor 2 u prethodnom eksperimentu. Znači, u semireflektivnom ogledalu u A imamo analogon prvog zastora sa dva otvora (oba stalno otvorena).

Analogija nije potpuna dok naš eksperimentalni uređaj ne snabdemo analogonima mehanizama za zatvaranje otvora 1 i 2. U tu svrhu na mestu A moramo imati mogućnost da po volji zamenimo semireflektivno ogledalo potpuno reflektivnim ogledalom — analogonom zatvaranja otvora 2 — ili pak golom staklenom pločom — analogonom zatvaranja otvora 1. Ovo se može postići, na primer, jednim diskom na kome se nalaze S-R. O., P-R. O. i staklena ploča i koji može da rotira oko horizontalne ose koja prolazi ispod lista hartije u A.

Sada na zastoru možemo da posmatramo interferencione obrasce u analogiji sa D_1, D_2 i $D_{1,2}$ (Crtež C 1.2).

1.1.9 Prednost eksperimenta sa ogledalima

Osnovna razlika između eksperimenta sa semireflektivnim ogledalom i difrakcije kroz dva otvora je u tome što su u prvom optičke putanje 1 i 2 *više razdvojene*, što otvara mogućnost vršenja posebnih merenja na njima. Stoga moramo imati mogućnost da ogledalo (P-R. O.) u B i u D

zamenimo detektorom.

Modifikaciju eksperimenta pomoću detektora proučićemo u sledećem odeljku.

1.2 Princip neodređenosti i komplementarnost

Na primeru ponašanja fotona na semireflektivnom ogledalu objasnićemo Heisenberg-ov princip neodređenosti i Bohr-ovu ideju komplementarnosti, kao i neodvojivost objektivnog dešavanja u mikro-svetu od eksperimentalnog uređaja posmatrača. Završićemo odeljak ukazujući na jedan paradoksalni aspekt opisanog ponašanja fotona.

1.2.1 Eksperimenti sa ogledalima

Vratimo se eksperimentalnom uređaju C 1.3. Na mestu A imaćemo stalno semireflektivno ogledalo, a na mesta B i D stavićemo u *varijanti a* potpuno reflektivna ogledala, a u *varijanti b* detektore. Radićemo sa slabim izvorom I koji emituje foton po foton.

Eksperiment u varijanti a je sličan difrakciji kroz dva otvora i njegov je ishod difrakcioni obrazac (na zastoru) koji je analogan krivoj $D_{1,2}$ (C 1.2B), tj. koji nastaje interferencijom fotona sa samim sobom usled istovremene propagacije i optičkom putanjom 1 i putanjom 2 (tj. foton se u A istovremeno i odbija i prolazi).

U varijanti b kad god detektor u B zabeleži da je prispeo foton, detektor u D ćuti i obratno, kad se foton detektuje u D, ne detektuje se u B. Znači, ne možemo detektovati delić fotona, već samo ceo foton i on je tada ili putanjom 1 stigao u B ili je pak putanjom 2 stigao u D (ali ne istovremeno oba događaja).

Varijantu b eksperimenta možemo da modifikujemo u *varijantu* b', tako što ćemo, recimo, samo u D imati detektor, a u B ćemo ostaviti ogledalo. Onda se jedan deo polaznog snopa fotona detektuje u D, a drugi deo koji se ne detektuje, znači koji ide optičkom putanjom 1, daće na zastoru difrakcioni obrazac koji je analogon od D_1 (C 1.2).

1.2.2 Razaranje interferencije

Možemo posumnjati da li difrakcioni obrazac tipa $D_{1,2}$ na zastoru nužno znači da se foton propagira istovremeno i putanjom 1 i putanjom 2. Stoga pokušajmo da izvršimo takvu modifikaciju eksperimenta da bi u njoj izmerili kojom putanjom foton ide, a da pri tome obe putanje ostaju otvorene radi interferencije na zastoru. Detektor u tački B ili D apsorbuje foton i prekida dotičnu putanju. Moramo da smislimo nešto drugo.

U stvari modifikovaćemo varijantu a eksperimenta i nazvaćemo to *varijantom* b''. Zamislićemo misaoni eksperiment u kome na samom semireflektivnom ogledalu u A možemo da merimo[1.2.1] impuls koji foton saopštava ogledalu kada se reflektuje na putanju 1. Tako ćemo onda uvek znati da li je foton krenuo putanjom 1 (kada se pojavljuje impuls od odbijanja fotona) ili putanjom 2 (kada ovaj impuls izostaje), a sam foton će bilo kojom od dve putanje stići u tačku C. Pitamo se šta je sa interferencijom.

[1.2.1] Ovde se radi o misaonom eksperimentu (tj. o nečemu što je samo u principu izvodljivo). U praksi je gotovo nemoguće postići da makroskopski objekt kao S-R. O. bude u takvom mikroskopskom stanju da se može eksperimentalno razlikovati da li mu je mikroskopski impuls od refleksije fotona sapšten ili ne.

Kao što čitalac već verovatno sluti, odgovor glasi: difrakcioni obrazac na zastoru u varijanti b'', nije analogon od $D_{1,2}$ već od $D_1 + D_2$ (C 1.2)! Mereći kojom putanjom foton ide razorili smo interferenciju.

1.2.3 Nerazdvojivost objekta i mernog aparata

Imajući u vidu pomenute rezultate, postavimo pitanje *šta se zapravo dešava sa fotonom* na semireflektivnom ogledalu u A; da li se cepa na dva dela i ide istovremeno i putanjom 1 i putanjom 2 (kao što bi to pravi, tj. klasični, talas učinio), ili pak pođe jednom od dveju putanja (kao što bi to prava, tj. klasična, čestica uradila).

Zahvaljujući pionirskim naporima Nielsa Bohr-a (čitati: Nils Bor) i Wernera Heisenberg-a, danas znamo da ovakvo pitanje nema smisla. Naime, ono pretpostavlja da se u prirodi nešto "dešava" nezavisno od posmatrača (ova pretpostavka je prećutno uvek prisutna u klasičnoj fizici), tj. da se procesi u domenu kvantnih pojava mogu odvojiti od uloge posmatrača. Međutim, u kvantnoj fizici ova premisa ne stoji[1.2.2]. *Opserver i kvantni objekt čine nerazdvojivu celinu*: ono što se dešava zavisi ne samo od mikro-objekta, već u presudnoj meri i od eksperimentalnog uređaja. Figurativno govoreći, u kvantnom domenu pojava ne možemo prosto slušati šta priroda govori, a da ona to govori jednako slušali mi ili ne. Moramo postavljati pitanja, a priroda daje odgovore. Pri tome je, kao što se često kaže, pitanje već pola odgovora.

U opisanoj varijanti a eksperimentalni uređaj je takav da merimo talasni aspekt interferencije svetlosti (zapravo mogućnosti putanje 1 i 2 interferiraju); čestični aspekt, koji se sastoji u odluci da li ići putanjom 1 ili 2, onda ostaje *neodređen*, ili, bolje rečeno, neostvaren. Nasuprot ovome, u varijanti b ili b' ili b'' merimo upravo čestični aspekt, tj. odluku po kojoj putanji će se foton kretati, a talasni aspekt je neodređen.

1.2.4 Princip neodređenosti

Tako smo došli do slavnog Heisenberg-ovog *principa neodređenosti*. On iskazuje da postoje aspekti ponašanja kvantnih objekata u kvantnim eksperimentima koji su u takvom odnosu da merenje jednog od njih *nužno čini drugi neodređenim*. Videćemo u odeljku § 2.1 da se neprecizni pojam "aspekta" može zameniti preciznim pojmom opservable, a u odeljku § 4.1 ćemo se uveriti da princip neodređenosti može da se iskaže u jednoj kvantitativnoj formi koja nosi malo drugačiji naziv: relacije neodređenosti.

1.2.5 Komplementarnost

Niels-u Bohr-u dugujemo jednu konceptualnu elaboraciju principa neodređenosti. Naime, za jedan aspekt ponašanja kvantnog objekta u kvantnom eksperimentu obično postoji više (čak i

[1.2.2]Iako ima suprotnih mišljenja u zapadnim krugovima naučnika koji se bave filosofijom fizike, autor ovih redova se pridružuje onima koji su ubeđenja da kvantnu nerazmrsivost objekta i subjekta ne treba shvatiti subjektivistički, kao da to umanjuje ili dovodi u sumnju objektivnu materijalnu egzistenciju spoljašnjeg sveta (tzv. bića). Radi se o tome da sve što je kvantna fizika u stanju da eksperimentalno kontroliše i teorijski izrazi, sve je to nužno hibridnog karaktera: zavisi i od kvantnog objekta i od makroskopskog mernog uređaja (pri čemu je sama svest posmatrača bez značaja).

beskonačno mnogo) drugih aspekata tako da važi princip neodređenosti. Ali često postoji jedan određeni drugi aspekt koji je na neki način antipod prvog, u smislu da je neodređenost tu naročito istražena (takoreći maksimalna). Takva dva aspekta Bohr naziva *komplementarnim*.

U gornjim eksperimentima varijanta a s jedne strane i varijante b ili b' ili b'' s druge, mere baš komplementarne aspekte ponašanja fotona. Merni uređaji dva komplementarna aspekta ponašanja *se uzajamno potpuno isključuju* u smislu da nije moguće napraviti treći uređaj koji bi objedinio bitne osobine ova dva uređaja. Zato, po Bohr-u, recimo u varijanti a *nema smisla* pitati se da li foton ide putanjom 1 ili 2. Ovo pitanje bi bilo zasnovano komplementarnim aspektom koji se isključuje u varijanti a. Obratno, fizički je bez smisla pitati se koju talasnu dužinu ispoljava foton u varijanti b ili b' ili b''. To je ovde komplementarni aspekt koji eksperimentalni uređaj dotične varijante isključuje.

Čitalac bez sumnje prepoznaje u komplementarnosti čestičnog i talasnog aspekta ponašanja kvantnog objekta poznatu čestično-talasnu dualnost. Ali ne radi se samo o promeni naziva za istu stvar, pojam komplementarnosti je šire zamišljen; on u stvari predstavlja uopštenje čestično-talasne dvojstvenosti kvantnih objekata.

1.2.6 Paradoksalnost

Kao što smo rekli, prolazak fotona kroz dva otvora i kroz poluposrebreno ogledalo sadrže osnovne crte kvantnog ponašanja i mogu da nam posluže kao prirodan uvod u prve postulate kvantne mehanike, kojima je posvećena sledeća glava. Ali bilo bi pogrešno zavaravati se da je time sve postalo sasvim jasno.

Prateći u stopu jedno rezonovanje koje potiče od Einstein-a, izložićemo sad jednu manje ortodoksnu diskusiju gornjih varijanti a i b' eksperimenta sa semireflektivnim ogledalom. Pošto rastojanja AB i AD mogu biti u principu proizvoljno velika, možemo pretpostaviti da eksperimentator donese odluku da li će u tački D imati ogledalo ili detektor *nakon* što je foton već prošao kroz S-R. O. u tački A. (Umesto eksperimentatora odluku može da donese i sama aparatura, tj. neki slučajni proces u njoj.) Znači, ova odluka o varijanti a ili b' u mestu D onda određuje (bez interakcije ili drugog vidljivog mehanizma) u *dalekom* mestu A i to u *prošlosti* da li da foton ide obema putanjama ili da krene jednom od njih! To je u najmanju ruku neobično čudno.

Videćemo u § 4.4.7 šta ovo znači u formalizmu kvantne mehanike i uverićemo se da se "čudnost" (ili paradoksalnost, kako se obično kaže) u stvari svodi na poznati paradoks distantnih korelacija. Ali već na ovom mestu možemo da konstatujemo da u kvantnim fenomenima ima nečeg *celinskog* u prostoru i vremenu, što je u pojmovnoj koliziji sa lokalnošću na koju smo navikli naročito u specijalnoj teoriji relativiteta. Naime, *lokalnost* zahteva da svaki događaj[1.2.3] u nekoj tački prostor-vremena (prostora Minkowskog) utiče *samo* na okolne tačke i da se ovaj uticaj širi (na sve strane) konačnom brzinom (propagacija signala). Videćemo da lokalnost ne možemo uskladiti sa tzv. distantnim korelacijama.

Treba napomenuti da se u savremenim laboratorijama koriste fotonski interferometri prikazani na crtežu C 1.3. Postoje i analogni neutronski interferometri. (Polupropusno ogledalo se naziva *beam splitter*, što na engleskom znači rascepljivač snopa.)

[1.2.3] kvantnoj fizici definiše samo u funkciji određenog mernog uređaja (određenog merenja). Vremenska evolucija kvantnog sistema izolovanog od opservera ne može se smatrati sukcesijom "događaja" kao u klasičnoj fizici.

1.3 Princip superpozicije

Pokazaćemo da iz eksperimenata opisanih u prethodnim odeljcima proizlazi jedan specifičan pojam: superpozicija stanja. Razrađujući ovaj pojam na primeru linearne polarizacije fotona, daćemo postepeni semi-intuitivni uvod u složeni sadržaj principa superpozicije, najosnovnijeg principa kvantne fizike.

1.3.1 Superpozicija stanja

U eksperimentu sa dva otvora kao i u eksperimentu sa semireflektivnim ogledalom (§ 1.1.2 odnosno § 1.1.8 i § 1.2.1) videli smo da jedan foton može da prolazi istovremeno oba optička puta koji su mu na raspolaganju (kroz oba otvora odnosno i da se odbije i da prođe kroz ogledalo). Istakli smo da je takva osobina poznata u klasičnoj talasnoj optici i da se sastoji u superpoziciji talasa.

Kada uređaj eksperimenta podesimo tako da smo sigurni da foton ide samo jednim od dva moguća optička puta, onda ćemo govoriti o određenom *stanju* fotona, što je u stvari pripadnost snopu fotona koji se prostire jednim od pomenutih puteva. Kada se foton prostire i jednim i drugim optičkim putem istovremeno, onda se kaže da su odgovarajuća dva stanja *superponirana* u novo stanje ili da se nalaze u *koherentnoj mešavini* pomenuta dva stanja.

1.3.2 Koeficijenti u superpoziciji

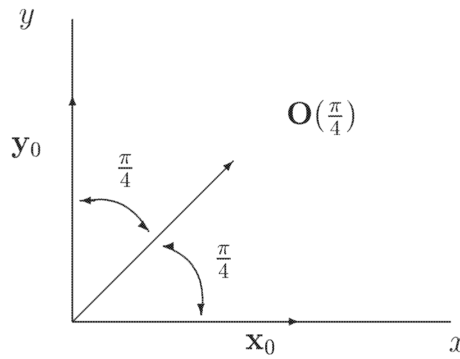
U klasičnoj teoriji talasa superpozicija se svodi na sabiranje amplitude talasnih oscilacija. Stoga se može očekivati da će i kvantna mehanika opisivati stanja entitetima koji se mogu *sabirati*.

Postavlja se pitanje da li se dva data stanja mogu superponirati samo u jednu superpoziciju, ili, kao što je to slučaj sa klasičnim talasima, dotična stanja mogu da učestvuju u superpoziciji sa različitim koeficijentima izražavajuci različiti *stepen učešća* stanja u koherentnoj mešavini; tako da ista dva stanja mogu da daju beskonačno mnogo superpozicija.

U našim eksperimentima sa dva optička puta konstrukcija eksperimenata je bila takva da su oba puta bila jednako verovatna. Možemo to lako promeniti smanjujući jedan od dva otvora u prvom zastoru odnosno stavljajući četvrt-posrebreno ogledalo itd. Onda se interferentni obrazac na drugom zastoru (koji potiče od interferencije dva optička puta) *osetno menja*, znači i superponirano stanje je znatno drugačije nego u prvobitnim eksperimentima. Dakle, odgovor je da postoje *koeficijenti* pri superponiranju.

Ova situacija sa potrebom da se stanja sabiru vodeći računa o stepenu učešća (što je u vezi sa verovatnoćom) podseća na sabiranje običnih vektora. Uzmimo realni dvo-dimenzionalni prostor radijus-vektora u ravni (Crtež C 1.4).

Pretpostavimo da ort x-ose, $\mathbf{x}_0$, na neki način predstavlja jedan optički put, a ort y-ose, $\mathbf{y}_0$, drugi optički put u našim eksperimentima. Onda bi stanju koje je koherentna smeša jednako verovatnih optičkih puteva mogao da odgovara ort $\mathbf{O}(\frac{\pi}{4})$, a superpozicijama nejednako verovatnih istih puteva fotona bi odgovarali ostali mogući ortovi između $\mathbf{x}_0$ i $\mathbf{y}_0$. Pošto je $\mathbf{O}(\frac{\pi}{4}) = \cos\frac{\pi}{4}\mathbf{x}_0 + \sin\frac{\pi}{4}\mathbf{y}_0$, pri ovom jednakom učešću dva stanja $\mathbf{x}_0$ i $\mathbf{y}_0$ koeficijenti su $\cos\frac{\pi}{4}$, a verovatnoće su $\frac{1}{2} = \cos^2\frac{\pi}{4}$.



Slika 1.4: **Foton polarisan duž $\mathbf{O}(\frac{\pi}{4})$.**

1.3.3 Linearna polarizacija

Za naša dva eksperimenta iz prethodnih odeljaka ortovi na Crtežu C 1.4 uspostavljaju samo neku analogiju sa onim što bi očekivali od teorije. Ali postoji jedan drugi svetlosni fenomen za koji ovi ortovi imaju precizno značenje. Radi se o *linearnoj polarizaciji* svetlosti.

Kao što je poznato iz klasične optike, neki kristali pogodno pripremljeni (tzv. Nicol-ove prizme) imaju tzv. optičku osu i svetlost koja kroz njih prođe je linearno polarizovana pod pravim uglom na optičku osu. Tu je Nicol-ova prizma u ulozi *polarizatora*, tj. uređaja koji priprema (preparira) polarizovan snop fotona. Pretpostavimo da se foton kreće pod pravim uglom na list hartije i to ka našem licu (recimo kroz koordinatni početak na Crtežu C 1.4). Neka $\mathbf{y}_0$ definiše pravac linearne polarizacije fotona[1.3.1] [1.3.2]

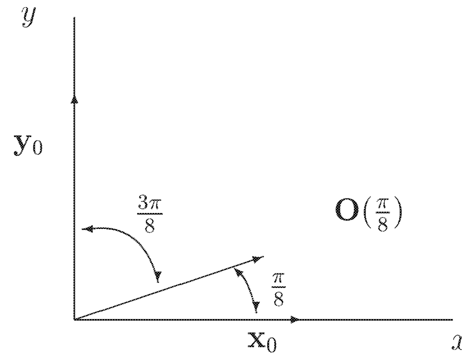
Ako se polarizovani foton propušta kroz kristal identičan gore opisanom, onda ta Nicol-ova prizma igra ulogu *analizatora*. Recimo da $\mathbf{y}_0$ definiše pravac linearne polarizacije fotona i za analizator. Onda naš foton sigurno prolazi kroz kristal. Međutim, ako $\mathbf{x}_0$ određuje pravac linearne polarizacije analizatora, foton sigurno neće proći (ugasiće se u kristalu).

Pretpostavimo sad da je polarizator bio zaokrenut tako da je foton linearno polarizovan duž orta $\mathbf{O}(\frac{\pi}{4})$ na Crtežu C 1.4. Analizator neka je u istom položaju kao malopre, tj. neka propušta samo fotone koji su polarisani duž x-ose. Šta će se desiti sa našim fotonom? On će ili proći (ceo, foton se ne može rasparčati), ili će ga analizator apsorbovati. Ako propustimo kroz isti analizator snop fotona identično polarizovanih (na polarizatoru u pomenutom položaju), proći će samo jedan deo njih i to oko polovine. Kao što smo i malopre imali, $\frac{1}{2} = \cos^2\frac{\pi}{4}$, a $\cos\frac{\pi}{4}$ je projekcija orta $\mathbf{O}(\frac{\pi}{4})$ na ort $\mathbf{x}_0$. Moramo se zapitati da li ovo dizanje koeficijenta na kvadrat ima dubljeg zračenja.

Odgovor ćemo lako dobiti malom izmenom našeg polarizaciono-analizacionog eksperimenta. Zaokrenimo polarizator tako da snop fotona koji prođe kroz njega bude linearno polarizovan duž orta $\mathbf{O}(\frac{\pi}{8})$ na Crtežu C 1.5. Neka analizator i dalje propušta samo linearno polarizovane fotone duž $\mathbf{x}_0$ (što se tiče njihove polarizacije nakon prolaska). Ispostavlja se da oko 85 procenata fotona

[1.3.1] Ort $\mathbf{y}_0$ u ovom primeru linearno polarizovanog fotona predstavlja unutrašnje stanje. Da bi dobili kompletno stanje fotona, $\mathbf{y}_0$ se mora dopuniti sa prostorno-vremenskim stanjem.

[1.3.2] Nekad se umesto o pravcu linearne polarizacije govori, na ekvivalentan način, i o polarizacionoj ravni, misleći, u našem slučaju, na yz-ravan (ort $\mathbf{z}_0$ je u smeru prostiranja fotona).



Slika 1.5: **Foton polarisan duž $\mathbf{O}(\frac{\pi}{8})$.**

prolazi, a $0,85 \approx \cos^2 \frac{\pi}{8}$.

U drugoj varijanti ovog eksperimenta ostavimo polarizator nepomeren (fotoni su polarizovani duž $\mathbf{O}(\frac{\pi}{8})$), a analizator zaokrenimo za $\frac{\pi}{2}$, tako da propušta samo fotone koji su polarizovani duž $\mathbf{y}_0$. Ispostavlja se da prolazi oko 14 posto fotona. Opet imamo $0.14 \approx \cos^2 \frac{3\pi}{8}$.

Pošto se ovi rezultati mogu dobiti sa snopom fotona bilo kog intenziteta i to za bilo koju orijentaciju polarizatora, očigledno, svaki foton ili prođe kroz analizator ili ne, a *verovatnoća prolaza jednaka je kvadratu projekcije* orta polarizacije fotona na ort propuštanja analizatora.

Lako je uočiti da mogućnosti raznih linearnih polarizacija uspostavljaju kontinuum intermedijernih stanja između $\mathbf{x}_0$-polarizacije i $\mathbf{y}_0$-polarizacije. U literaturi je pokazano da postoji kontinuum međđustanja i između gore pomenutih čestičnih i talasnih stanja kvantne čestice.

1.3.4 Nelinearne polarizacije

Uverili smo se da se pri superpoziciji stanja kvantnomehaničkog sistema radi o sabiranju vektora u vektorskom prostoru (koji igra ulogu prostora stanja). Ali postavlja se još pitanje da li je realni vektorski prostor (kao na Crtežu C 1.4 i C 1.5) uvek dovoljan; pre svega da li je dovoljan za potpuno opisivanje polarizacionih pojava svetlosti.

Za linearnu polarizaciju je dvodimenzionalni realni vektorski prostor, kao što smo videli, dovoljan. Ali, kao što je poznato, postoje i druge polarizacije fotona: cirkularne, eliptične itd. One se, da podsetimo, opisuju pomoću vektora iz dvodimenzionalnog *kompleksnog* vektorskog prostora (koji dobijamo množeći ortove $\mathbf{x}_0$ i $\mathbf{y}_0$ sa kompleksnim brojevima).

Na primer, desno cirkularno polarizovano stanje fotona opisuje se vektorom stanja (u stvari ortom u dvodimenzionalnom kompleksnom vektorskom prostoru):

$$(-\frac{\imath}{\sqrt{2}}\mathbf{x}_0 + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{y}_0)e^{\imath\omega t}, \tag{1.3.1}$$

gde je ω frekvencija, a t vreme. Kao što se vidi iz (1.3.1), upotrebom kompleksnih koeficijenata (razvijanja kompleksnog vektora stanja po $\mathbf{x}_0$ i $\mathbf{y}_0$ kao bazisu) pojavljuje se konstantna (u vremenu) razlika u fazi između linearnog oscilovanja duž x-ose i oscilovanja duž y-ose (jer $\imath = e^{\imath\frac{\pi}{2}}$), što i dovodi do cirkularne polarizacije.

1.3.5 Princip superpozicije

Na kraju ovog semi-intuitivnog uvođenja u sadržaj pojma koherentnog mešanja, možemo reći da se *princip superpozicije* (ili princip koherentnog mešanja) stanja u stvari sastoji u izražavanju stanja fizičkog sistema ortovima koji su elementi kompleksnog linearnog vektorskog prostora, tako da sabiranje vektora odražava mogućnosti fizičke superpozicije stanja.

1.4 Osnovni statistički pojmovi u fizici

U ovom odeljku daćemo koncizni pregled nekih osnovnih pojmova bilo koje statističke oblasti fizike. Ovi pojmovi leže podjednako u osnovi kvantne mehanike kao i klasične statističke fizike. Svrha ovog pregleda je da se otkloni mogućnost nesporazuma i uspostavi jedan statistički rečnik koji će biti neophodan u izlaganju kursa. Neke dovoljno važne opšte teoreme ćemo i dokazati. Što se tiče ilustracije pojmova, oslonićemo se na eksperimente iz odeljaka § 1.1,§ 1.2 i § 1.3.

1.4.1 Statistički ansambl

Osnovni pojam i istovremeno osnovni predmet proučavanja svake statističke nauke je *statistički ansambl*. To je, po definiciji, dovoljno velik broj po nečemu *jednakih* objekata. Najmanji broj objekata koji je dovoljno velik varira od jedne primene do druge i većinom se empirijski određuje, a po čemu objekti moraju biti jednaki, to takođe zavisi od definicije konkretnog statističkog ansambla.

Mi smo imali primer ansambla (snopa) fotona kako u eksperimentu sa dva otvora, tako i u eksperimentu sa semireflektivnim ogledalom.

1.4.2 Osnovne vrste statističkih ansambala

Pre svega postoje tzv. prostorni ansambli (nekad zvani i Boltzmann-ovi ansambli), u kojima se objekti (elementi ansambla) nalaze istovremeno jedan pored drugog u prostoru. Ali, što je od presudne važnosti, sve posmatrane pojave potiču od svakog objekta pojedinačno, a veliki broj istovremeno prisutnih objekata (na primer fotona) samo daje obično nagomilavanje, intenzifikaciju efekata.

Kao što smo rekli ranije, oba eksperimenta iz odeljaka § 1.1 i § 1.2 mogu se izvesti i u varijanti sa tzv. *vremenskim ansamblima* fotona. U ovakvom ansamblu objekti su raspoređeni po vremenskoj osi, tj. objekti se pojavljuju jedan posle drugog, nikad dva istovremeno. U našim primerima fotonski ili elektronski izvor je izračivao jednu po jednu česticu.

U stvari, prostorni i vremenski ansambli predstavljaju dve krajnosti. Najčešće se susreću *prostorno-vremenski ansambli*, kao snop fotona ili elektrona, kojih i trenutno ima priličan broj jedan pored drugog u prostoru, a i vršimo akumuliranje dotičnih čestica u izvesnom vremenskom intervalu (kako bismo postigli dovoljnu intenzivnost merenih efekata).

1.4.3 Preparacija ansambla

Mada često nailazimo na ansamble u prirodi (na pr. atmosfera je ansambl molekula vazduha), to u stvari nisu ansambli u statističkom smislu, jer nismo sigurni da *svi* elementi ansambla imaju jednu ili više *jednakih* osobina koje karakterišu statistički ansambl. Zato je statistički ansambl potrebno u početnom trenutku pripremiti ili preparirati kako bi se osvedočili da svaki element ima osobine o kojima je reč. Ova *preparacija* ansambla u početnom trenutku u stvari predstavlja *početni uslov.* U našim primerima preparaciju vrši izvor monohromatske svetlosti (zajedno sa kolimatorom ako ga ima), koji upućuje snop fotona ka otvorima zastora odnosno ka semireflektivnom ogledalu. U ovom slučaju "jednake" osobine fotona su određena talasna dužina i odgovarajuća usmerenost u kretanju.

1.4.4 Stohastičke varijable i distribucije po događajima

Osnovne predikcije statističke nauke su verovatnoće pojedinih događaja. U fizici se *događaj* obično definiše kao dobijanje određene brojne vrednosti određene realne *stohastičke (ili statističke) varijable*, koja se, sa svoje strane, definiše određenim skupom realnih vrednosti i određenim mernim postupkom.

Vratimo se, primera radi, našim eksperimentima. Pretpostavimo da zastor na kome se opaža interferentni obrazac ima pojednostavljenu formu kao na Crtežu C 1.6, tj. da se sastoji od 8 kvadratića, a geometrija celog eksperimenta da je takva da svaki foton mora pasti na zastor ("idealni" eksperiment). Stohastičku varijablu X onda možemo da definišemo tako da uzima vrednosti 1,2,...,8, a pojedine vrednosti znače da je foton pao u kvadratić označen tim brojem. (Drugi primer imamo u bacanju kocke.)

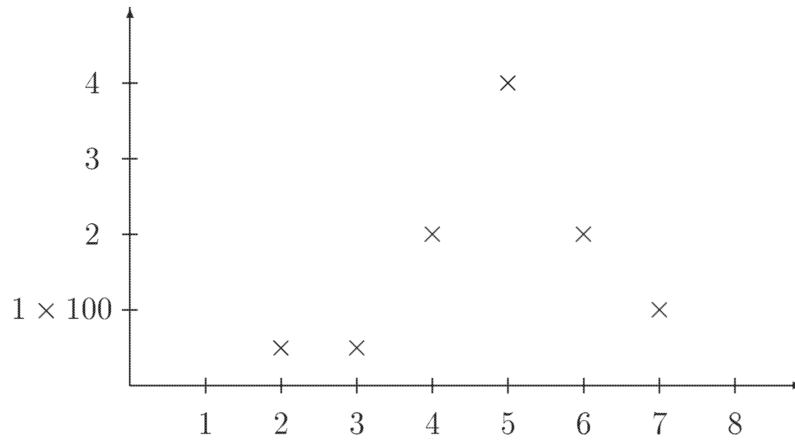
1	2	3	4	5	6	7	8

Slika 1.6: **Zastor**. *Vrednosti stohastičke varijable su* $1, \ldots, 8$.

Zamislimo jedan prostorno-vremenski ansambl fotona koji pada na zastor. Recimo, radi jednostavnosti, da pri datom intenzitetu svetlosti i pri datom intervalu eksponiranja zastora (koji možemo da zamislimo i kao foto-ploču) imamo 1000 upadnih fotona (broj sigurno premali za jasan interferencioni obrazac, ali dovoljan za našu ilustraciju pojmova). Neka je raspored ili *distribucija* fotona po kvadratićima zastora data, recimo, krivom kao na Crtežu C 1.7. Na apscisi su nanesene vrednosti varijable X (tj. brojne oznake kvadratića), a na ordinati je prikazan broj fotona koji je pao na dotični kvadratić i to, radi jednostavnosti, u stotinama fotona.

1.4.5 Verovatnoća

Na kvadratić 5, na primer, palo je 400 od 1000 fotona. Broj 400 je frekvencija, a broj $\frac{400}{1000} = \frac{2}{5}$ je *relativna frekvencija* dotičnog događaja pri merenju. To je, po definiciji, pravi razlomak koji



Slika 1.7: **Distribucija rezultata merenja** *stohastičke varijable sa Crteža C 1.6 u eksperimentu sa 1000 fotona.*

pokazuje za koliki deo od ukupnog broja objekata u ansamblu se dotični događaj desio. Pri tome se, naravno, pretpostavlja da se na svakom elementu ansambla vršilo merenje — u našem primeru, da je svaki foton pao na zastor. Relativna frekvencija događaja 4, 6 i 7 je $\frac{1}{5}$, odnosno $\frac{1}{5}$, odnosno $\frac{1}{10}$.

Svrha *verovatnoće* nekog događaja je da predskaže njegovu relativnu frekvenciju pri odgovarajućem merenju. Verovatnoća v_i i-tog događaja definiše se kao granična vrednost relativne frekvencije $\frac{N_i}{N}$ i-tog događaja kada broj elemenata u ansamblu (tj. veličina ansambla) N teži beskonačnosti.

Pošto $\frac{N_i}{N} \geq 0$, $\sum_i \frac{N_i}{N} = \frac{N}{N} = 1$, uvek važe veoma važne relacije koje izražavaju *nenegativnost* verovatnoće, odnosno njenu *normiranost* (na jedinicu):

$$\boxed{v_i \geq 0, \quad i = 1, 2, ... ; \sum_i v_i = 1}. \qquad (1.4.1a,b)$$

1.4.6 Klasični prostor događaja

Vrednosti 1,2,...,8 stohastičke promenljive X sa Crteža C 1.6 su događaji koji određuju tzv. *prostor događaja.* To je, po definiciji, skup svih elementarnih i složenih događaja. *Elementarni događaji* u našem primeru su same pomenute vrednosti varijable, a jedan složen događaj na pr. glasi: (1 ili 5 ili 7). Očigledno, prostor događaja svodi se na isto što i partitivni skup (tj. skup svih podskupova od) skupa $\{1, 2, ..., 8\}$, samo što se operacija unije zamenjuje operacijom "ili", koja se obeležava takođe sa $\cup$ (kao i unija). Skupovna operacija "presek" zamenjuje se događajnom operacijom "istovremeno"; na pr., događaj (1 ili 3) istovremeno sa događajem (1 ili 5) je događaj (1). Ova operacija obeležava se sa $\cap$ (kao i presek skupova)[1.4.1].

Ako pri merenju promenljive X na statističkom ansamblu od N objekata dobijemo na N_i objekata rezultat $X = i$, $i = 1, 2, ..., 8$, onda je relativna frekvencija na pr. složenog događaja (1

[1.4.1] Prostor događaja je po strukturi, kao i partitivni skup, tzv. Bool-ova (čitati: Bulova) algebra.

ili 5 ili 7) očigledno $\frac{N_1+N_5+N_7}{N}$, a verovatnoća mu je

$$v(1 \text{ ili } 5 \text{ ili } 7) = v(1) + v(5) + v(7), \tag{1.4.2}$$

tj. jednaka je *zbiru* verovatnoća elementarnih događaja na koje se dotični složeni događaj razlaže.

Kaže se da su dva događaja *disjunktna* ako nemaju ni jedan zajednički elementaran događaj (u analogiji sa disjunktnim skupovima, koji nemaju zajednički element). Na primer, događaj "parne vrednosti od X" i događaj "neparne vrednosti od X" su disjunktni. Očigledno, verovatnoća događaja koji se dobija operacijom "ili" iz dva ili više disjunktna događaja jednaka je *zbiru* verovatnoća tih pojedinih događaja na koje se složeniji događaj razlaže (bez obzira da li su ovi elementarni ili složeni sa svoje strane).

U prostoru događaja postoji sigurni događaj i nemogući događaj. Ovi događaji se često nazivaju i *apsolutno sigurnim* i *apsolutno nemogućim*, jer se u svakom pojedinom merenju prvi mora desiti, a drugi ne može desiti. Kako god da se zada verovatnoća, ona sigurnom događaju mora da pripiše 1, a nemogućem 0. U slučaju pomenutog prostora događaja apsolutno sigurni događaj je (1 ili 2 ili...ili 8), a apsolutno nemogući događaj je (nijedna vrednost).

Jedna konkretna tzv. *distribucija verovatnoće* v_i, $i = 1, 2, ..., 8$ (to je zadavanje verovatnoće svih elementarnih događaja) na prostoru događaja može da pripiše vrednost 1 i događaju koji nije apsolutno siguran, a vrednost 0 i događaju koji nije apsolutno nemoguć. Onda se govori o *stohastički sigurnom* odnosno o *stohastički nemogućem* događaju (relativni pojmovi, definisani u odnosu na dotičnu distribuciju verovatnoće v_i !). U ansamblu od 8 događaja koji opisuje dotična distribucija verovatnoće stohastički siguran događaj se može desiti $N_s < N$ puta, a stohastički nemogući događaj $N_n > 0$ puta, ali $\frac{N_s}{N} \to 1$ kad $N \to \infty$ i $\frac{N_n}{N} \to 0$ kad $N \to \infty$.

1.4.7 Uslovna verovatnoća

Kao što smo rekli, $a \cap b$ je događaj koji se definiše kao događaj a istovremeno sa događajem b. Pored obične relativne frekvencije $\frac{N_{a\cap b}}{N}$ događaja $a \cap b$, od važnosti je i uslovna relativna frekvencija $\frac{N_{a\cap b}}{N_a}$ (uslov je da se događaj a desio), a još više njen limes[1.4.2]:

$$v_a(b) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{N_a\to\infty} \frac{N_{a\cap b}}{N_a}, \tag{1.4.3}$$

koji se naziva *uslovnom verovatnoćom* (a je uslovni, a b je tekući događaj). Radi razlikovanja od uslovne, o običnoj verovatnoći se ponekad govori kao o apsolutnoj verovatnoći.

Osnovni teorem uslovne verovatnoće glasi:

$$v(a \cap b) = v(a).v_a(b). \tag{1.4.4}$$

Lako se vidi da iz (1.4.3) odmah sledi (1.4.4), kao relacija koja povezuje apsolutnu i uslovnu verovatnoću. Na osnovu (1.4.4) znamo kojoj apsolutnoj verovatnoći odgovara koja uslovna verovatnoća (obe su definisane na istim frekvencijama N_a).

Kaže se da događaj b implicira događaj a, i piše se $b \subset a$ ako $b = a \cap b$ (tj. kad god se desi b, desio se i a, tj. a je složeniji događaj). Onda se a može razložiti na b i na još neki sa b disjunktan događaj. Iz (1.4.4) sledi za slučaj da $b \subset a$:

$$v(b) = v(a)v_a(b). \tag{1.4.5}$$

[1.4.2] Simbolom "$\stackrel{\text{def}}{=}$" označavaćemo "po definiciji jednako".

1.4.8 Srednja vrednost

Ako je neka stohastička varijabla X diskretna, npr. ako uzima vrednosti iz nekog diskretnog skupa realnih brojeva $X = \{x_1, x_2, \ldots\}$, onda se *srednja* ili *očekivana vrednost* od X, koja se piše $\overline{X}$ (u kvantnoj mehanici često kao $\langle\, X\, \rangle$), definiše kao aritmetička srednja vrednost:

$$\overline{X} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i x_i \frac{N_i}{N}, \tag{1.4.6a}$$

gde je $\frac{N_i}{N}$ relativna frekvencija događaja x_i. Ako se uzme N dovoljno veliko i izjednači relativna frekvencija $\frac{N_i}{N}$ sa odgovarajućom verovatnoćom v_i, onda se (1.4.6a) svodi na

$$\boxed{\overline{X} \stackrel{\text{def}}{=} \textstyle\sum_i x_i v_i}. \tag{1.4.6b}$$

Često se o (1.4.6b) govori kao o usrednjavanju varijable X.

Treba uočiti da u slučaju diskretne varijable X, srednja vrednost ne mora biti jedna od mogućih vrednosti $x_1, x_2, \ldots$ te varijable. A ako slučajno jeste, ne mora biti najverovatnija vrednost.

1.4.9 Gustina verovatnoće

Ako je stohastička varijabla Y neprekidna, npr. ako uzima kontinualno sve vrednosti iz nekog intervala (a, b), onda se obično definiše *gustina verovatnoće* $\rho(y)$ tako da je $\rho(y)\,\mathrm{d}y$ (infinitezimalna) verovatnoća da se pri merenju promenljive Y dobije vrednost iz (infinitezimalnog) intervala $(y - \frac{1}{2}\,\mathrm{d}y, y + \frac{1}{2}\,\mathrm{d}y)$. Srednja vrednost je u ovom slučaju

$$\boxed{\overline{Y} \stackrel{\text{def}}{=} \textstyle\int_a^b y\rho(y)\,\mathrm{d}y}. \tag{1.4.7}$$

1.4.10 Neodređenost distribucije

Pored srednje vrednosti, najvažnija veličina koja nam daje kvantitativne informacije o distribuciji verovatnoće po mogućim vrednostima stohastičke varijable X je tzv. *neodređenost* ili *standardna devijacija* ΔX. To je, po definiciji, pozitivni kvadratni koren iz srednje kvadratne devijacije:

$$\Delta X \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\overline{(x_i - \overline{X})^2}} = \sqrt{\sum_i v_i (x_i - \overline{X})^2}. \tag{1.4.8a}$$

Naime, $(x_i - \overline{X})$ su pojedine $(i = 1, 2, \ldots)$ devijacije ili odstupanja (od srednje vrednosti), $(x_i - \overline{X})^2$ su pojedine kvadratne devijacije, a $\overline{(x_i - \overline{X})^2}$ je srednja kvadratna devijacija $(\Delta X)^2$, koja se često naziva i disperzijom.

Ako stohastička varijabla Y nije diskretna nego je neprekidna, onda se ΔY definiše po uzoru na sledeći obrazac:

$$\Delta Y \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\int_a^b \rho(y)(y - \overline{Y})^2\,\mathrm{d}y}, \tag{1.4.8b}$$

koji važi za primer varijable definisane u intervalu (a, b).

Sada ćemo da dokažemo veoma važan teorem za neodređenost distribucije verovatnoće.

Teorem 1.4.1 *Za svaku stohastičku varijablu Z i za svaku distribuciju verovatnoće po mogućim vrednostima od Z kvadrat neodređenosti $((\Delta Z)^2$ je jednak razlici srednje vrednosti kvadrata varijable i kvadrata srednje vrednosti varijable:*

$$\boxed{(\Delta Z)^2 \stackrel{\text{def}}{=} \overline{Z^2} - \overline{Z}^2}. \tag{1.4.9}$$

Dokaz: [1.4.3] $(\Delta Z)^2 = \overline{(Z - \overline{Z})^2} = \overline{Z^2 - 2Z\overline{Z} + \overline{Z}^2} = \overline{Z^2} - 2\overline{Z}^2 + \overline{Z}^2 = \overline{Z^2} - \overline{Z}^2$. *Q. E. D.*

***Napomena* 1.4.1** U dokazu smo $(Z - \overline{Z})^2$ tretirali kao novu stohastičku varijablu koja je funkcija varijable Z (i ona je diskretna ili kontinualna već prema tome da li je Z diskretna ili kontinualna varijabla). Osim toga, iskoristili smo sledeće dve osnovne osobine srednje vrednosti, koje neposredno slede iz definicije (1.4.6b) i (1.4.7):

a) srednja vrednost je *linearni* funkcional na skupu varijabli, tj. $\overline{(aZ_1 + bZ_2)} = a\overline{Z_1} + b\overline{Z_2}$, gde su a i b brojevi, a Z_1 i Z_2 varijable (a "funkcional" znači unarno preslikavanje, tj. preslikavanje po jednog elementa iz nekog skupa, i to u brojeve);

b) srednja vrednost konstante je ta ista konstanta: $Z = a \;\Rightarrow\; \overline{Z} = a$.

Očigledno, rezonovanje u dokazu Teorema T 1.4.1 ne zavisi od toga da li je Z diskretna ili neprekidna varijabla.

1.4.11 Oštra vrednost varijable

Neka je X diskretna stohastička varijabla koja uzima (konačno ili prebrojivo beskonačno mnogo ne nužno različitih) vrednosti $x_1, x_2, \ldots$ Neka je $v_1, v_2, \ldots$ jedna zadata distribucija verovatnoće. Kaže se da X ima oštru vrednost x_{i_0} ako

$$v_i = 0 \text{ kad god } x_i \neq x_{i_0}, \tag{1.4.10}$$

tj. ako je jedna od vrednosti varijable stohastički sigurna, a sve ostale vrednosti su stohastički nemoguće.

Sada ćemo dokazati važan potreban i dovoljan uslov za to da diskretna varijabla X ima oštru vrednost pri zadatoj distribuciji verovatnoće v_i.

Teorem 1.4.2 *Neka je X diskretna stohastička varijabla, a v_i, $i = 1, 2, \ldots$ zadata distribucija verovatnoća. X ima oštru vrednost ako i samo ako je neodređenost nula:*

$$\boxed{\Delta X = 0}. \tag{1.4.11}$$

Dokaz: a) Potrebnost. Pretpostavimo da v_i zadovoljava (1.4.10). Onda $\overline{X} = \sum_i v_i x_i = x_{i_0}$ i $(\Delta X)^2 = \sum_i v_i (x_i - x_{i_0})^2 = 0$.
b) Dovoljnost. Pretpostavimo da važi $\Delta X = 0$, tj. $\sum_i v_i (x_i - \overline{X})^2 = 0$. Pošto je ovde zbir nenegativnih brojeva nula (uporediti (1.4.1a) i imati u vidu da tretiramo samo realne varijable), svaki sabirak posebno mora biti nula[1.4.4]: $v_i (x_i - \overline{X})^2 = 0$, $\forall i$. Pošto svaka distribucija verovatnoće mora biti normirana na jedinicu (uporediti (1.4.1b)), a sve su verovatnoće nenegativne, bar za jednu vrednost indeksa moramo imati pozitivnu verovatnoću. Neka j prebrojava elementarne događaje (tj. vrednosti od i) za koje je verovatnoća pozitivna. Iz gornjeg sledi: $v_j (x_j - \overline{X})^2 = 0, \Rightarrow (x_j - \overline{X})^2 = 0 \Rightarrow x_j = \overline{X}$, $\forall j$. Dakle, $\overline{X}$ je jedna od mogućih vrednosti i ona je stohastički sigurna (jer se sve x_j podudaraju), tj. X ima oštru vrednost. *Q. E. D.*

[1.4.3] "Q. E. D." je skraćeno od *quad erat demonstrandum*; to na latinskom znači: što je trebalo pokazati.
[1.4.4] Simbolom "$\forall$" označavamo "za svaku od mogućih vrednosti".

1.4.12 Mešanje ansambala

Statističke ansamble možemo pomešati u nadansambl. Neka imamo, recimo, K ansambala sa po N_k, $k = 1, 2, ..., K$ objekata u njima. Pod *mešanjem* ovih ansambala podrazumeva se uzimanje nadansambla od svih $N = \sum_{k=1}^{K} N_k$ objekata. (U nadansamblu objekti su "pomešani", tj. ne zna se koji objekt potiče iz kog od K prvobitnih ansambala.)

Nadansambl se naziva mešavinom ili smešom (K prvobitnih ansambala), a razlomci $w_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N_k}{N}$ nazivaju se *statističkim težinama* podansambala $k = 1, 2, ..., K$ u njemu[1.4.5]. Kada $N_k \to \infty$, $\forall k$, onda i $N \to \infty$ i (što u stvari kompletira definiciju mešanja ansambala) statističke težine w_k *ostaju nepromenjene.*

Ako su bar dva podansambla "različita", onda se za nadansambl kaže da je *nehomogen* ili *mešan* (u užem smislu). Ako se, naprotiv, neki statistički ansambl ne može dobiti mešanjem dva ili više ansambala od kojih su bar dva različita, onda se kaže da je ansambl *homogen* ili *čist.* Mešanim ansamblom u širem smislu naziva se ansambl koji je nehomogen ili (u specijalnom slučaju) homogen.

U eksperimentu sa semireflektivnim ogledalom u varijanti b'' (videti § 1.2.2) skup svih fotona koji stignu na zastor je nadansambl ili mešavina sastavljena od dva podansambla: od skupa svih fotona koji optičkom putanjom 1 (prvi podansambl) i od skupa svih fotona koji idu optičkom putanjom 2 (drugi podansambl). Pošto semireflektivno ogledalo jednak broj fotona reflektuje i propušta, ovde su statističke težine $\frac{N_1}{N} = \frac{N_2}{N} = \frac{1}{2}$.

Mešavinu (nadansambl) treba dobro razlikovati od koherentne mešavine ili superpozicije (§ 1.3.1). Varijanta *a* eksperimenta sa semireflektivnim ogledalom (§ 1.2.1) daje superpoziciju (difrakcioni obrazac tipa $D_{1,2}$, C 1.2), a, kao što smo rekli, u varijanti b'' imamo primer za običnu (tj. nekoherentnu) mešavinu ansambala (difrakcioni obrazac tipa $D_1 + D_2$).

1.4.13 Vremenska evolucija

Ako u toku nekog vremenskog intervala eksperimentator ne vrši nikakvu intervenciju na objektima ansambla, onda se sa svim tim objektima dešava spontana vremenska evolucija (promena po zakonu kretanja). Samim tim menja se i statistički ansambl i ova promena se naziva *vremenskom evolucijom ansambla.* Teorijsko znanje o objektima u ansamblu, koje se, kao što smo videli, izražava raspodelama verovatnoća v_i, takođe mora (u opštem slučaju) da se menja pri vremenskoj evoluciji.

1.4.14 Selektivno i neselektivno merenje

Prilikom merenja jedne diskretne stohastičke varijable X na ansamblu, možemo na dva načina dobiti krajnji ansambl:

i) ako izdvojimo podansambl svih objekata iz ansambla na kojima smo dobili određeni unapred fiksirani rezultat x_i pri merenju X, onda govorimo o *selektivnom merenju* vrednosti x_i od X;

[1.4.5] Statističke težine su analogoni kvadrata od modula koeficijenata u superpoziciji, uporediti § 1.3.2 i § 1.3.3.

ii) ako i nakon merenja sve objekte ostavimo u jednom ansamblu, onda govorimo o *neselektivnom merenju.*

Pri neselektivnom merenju se broj sistema u ansamblu konzervira, tj. i nakon merenja imamo sve objekte ansambla u vidu. Nasuprot tome, pri selektivnom merenju ograničavamo se posle merenja na podansambl i ispuštamo iz vida sve objekte na kojima nismo dobili unapred fiksirani rezultat.

Ansambl koji nastaje neselektivnim merenjem varijable X je mešavina podansambala koji nastaju selektivnim merenjem, a statističke težine su pri tome jednake relativnim frekvencijama, tj. (približno) verovatnoćama v_i.

1.4.15 Prediktivno i retrospektivno merenje

Radi ilustracije pojmova iz prethodnog paragrafa, vratimo se na linearnu polarizaciju svetlosti (§ 1.3.3). Pretpostavimo da je polarizator preparirao čisti snop fotona polarisanih duž orta $\mathbf{O}(\frac{\pi}{4})$. Postavimo analizator duž orta $\mathbf{x}_0$. Na fotonima koji prođu analizator izvršili smo selektivno merenje[1.4.6] linearne polarisanosti duž $\mathbf{x}_0$, a njihov snop (koji se ovog puta sam izdvaja) je ilustracija podansambla koji posle merenja sadrži sve objekte sa određenim mernim rezultatom. Tu se radi o tzv. *prediktivnom merenju*, jer je to merenje koje omogućuje da predskažemo (izvršimo predikciju) u kom će se stanju foton naći posle merenja.

Za fotone koje je analizator apsorbovao se u stvari ispostavilo da su bili polarizovani duž $\mathbf{y}_0$ orta. Na njima je, kao što se kaže, *retrospektivno* izmeren dotični rezultat. Naime, rezultat se odnosi na prošlost: na trenutak početka interakcije fotona sa mernim aparatom.

Pošto foton ili prođe ili bude apsorbovan u analizatoru, "analiza" može da se smatra neselektivnim merenjem u kome se odlučuje da li je foton polarizovan duž $\mathbf{x}_0$ ili ortogonalno na njega. Samo, kao što smo videli, ovo je delom prediktivno, a delom retrospektivno merenje, tako da se ne uklapa u potpunosti u gornju definiciju neselektivnog merenja, jer smo gore imali u vidu (kao što je to uobičajeno u kvantnoj mehanici) isključivo prediktivno merenje.

1.4.16 Promena ansambla pri merenju

Kao što je poznato, u klasičnoj fizici se pretpostavlja da merenje uopšte *ne menja* objekte u ansamblu, već samo dovodi do saznanja koja je vrednost merene varijable. U stvari, i u klasičnoj fizici realno merenje uspostavlja privremenu interakciju između mernog aparata i merenog objekta i zato, po pravilu, dolazi do izvesne promene osobina i, prema tome, do promene stanja objekta. Ali teorija korespondira *idealnom*, a ne realnom, eksperimentu, a to je po definiciji granični slučaj realnog eksperimenta u kome i jačina interakcije i vreme trajanja interakcije teže nuli. Onda naravno i pomenuta promena osobina objekta izazvana interakcijom teži nuli.

U kvantnoj mehanici se svaka interakcija svodi na izmenu dejstva između interagujućih fizičkih sistema, a dejstvo se izmenjuje u kvantima h (Planck-ova konstanta). Znači, postoji minimalna izmena dejstva (jedan kvant), te u principu ne možemo da pustimo interakciju da teži nuli. Prema tome i idealno merenje u kvantnoj mehanici (koje je i ovde po definiciji granični slučaj u kome je

[1.4.6] U ovom eksperimentu nemamo na prirodan način definisanu stohastičku varijablu sa mogućim vrednostima, mada to možemo formalno lako učiniti.

sve sporedno pušteno da teži nuli) dovodi, u opštem slučaju, nužno do *promene* ansambla. Stoga kvantnomehaničko neselektivno merenje često promeni ansambl, dok se u analognom klasičnom merenju to nikad ne dešava.

Glava 2

STATISTIČKI POSTULATI I GEOMETRIJA KVANTNE MEHANIKE

2.1 Stanja, opservable i verovatnoća

U ovom odeljku započinjemo deduktivnu izgradnju kvantne mehanike formulacijom tri najosnovnija postulata. Oni daju odgovor na sledeća pitanja:

i) kako teorijski izraziti homogeni kvantni ansambl?

ii) kako opisati ponašanje objekata u eksperimentima?

iii) kako izračunati verovatnoće pojedinih mernih rezultata?

Izvešćemo i nekoliko neposrednih posledica prva tri postulata.

2.1.1 Čisti kvantni ansambli

Svaki fizički sistem je u osnovi kvantni sistem, ali izvesna gruba posmatranja na njemu mogu da se objasne klasičnom fizikom, koja se smatra aproksimacijom kvantne mehanike (u kojoj h teži nuli). Prema tome, o fizičkom sistemu se govori kao o *kvantnom sistemu* ako se na njemu vrše merenja čiji se rezultati ne mogu objasniti u aproksimaciji klasične fizike, već je za to neophodna kvantna mehanika.

Statistički ansambl sastavljen od "jednakih" kvantnih sistema naziva se *kvantnim ansamblom*. "Jednakost" svakako sadrži iskaz da se radi o istoj vrsti fizičkog sistema[2.1.1] (npr. o atomu vodonika). U preparaciji ansambla "jednakost" dobija precizan sadržaj.

Dva kvantna ansambla se smatraju *ekvivalentnim* ako daju jednake distribucije verovatnoće po mernim rezultatima *svake* stohastičke varijable. Ekvivalentni ansambli se opisuju istim matematičkim entitetom[2.1.2]. Kvantni ansambl se naziva *homogenim* ili *čistim* ako nije ekvivalentan

[2.1.1] U kvantnoj mehanici se pretpostavlja da je vrsta kvantnog sistema unapred fiksirana i onda joj se, kao što ćemo videti, pridružuje prostor stanja. Sav kvantnomehanički formalizam i kvantne zakonitosti formulišu se u prostoru stanja dotičnog kvantnog sistema.

mešavini kvantnih ansambala od kojih su bar dva uzajamno neekvivalentna, tj. ako nije *nehomogen*. Kada se ima u vidu kvantni sistem koji pripada čistom kvantnom ansamblu, obično se govori o *čistom stanju*, ili najčešće kratko o *stanju*, sistema. Takozvano *mešano stanje* kvantnog sistema, što u stvari znači da sistem pripada kvantnom ansamblu koji može biti i nehomogen, proučićemo detaljnije u odeljku § 4.3.

Čisto stanje je osnovni pojam pri opisivanju kvantnog sistema i predstavlja analogon klasičnog čistog stanja, tj. tačke u faznom prostoru sistema. U čistom stanju kvantni sistem je maksimalno precizno i potpuno opisan.

Veliki pioniri kvantne mehanike Niels Bohr, Werner Heisenberg, Wolfgang Pauli, Max Born itd. (tzv. kopenhagenska škola mišljenja) smatrali su da je kvantni čisti ansambl homogen u apsolutnom smislu, tj. da je fizički besmisleno postaviti pitanje da li je to možda mešavina neekvivalentnih subkvantnih podansambala (karakterisanih tzv. skrivenim parametrima). Takođe su zamišljali čisto stanje kao stanje individualnog kvantnog sistema, a ansambl su smatrali neophodnim samo za laboratorijsko osmišljavanje distribucije verovatnoće po rezultatima merenja. Danas njihov stav sve više podleže preispitivanju. Eksperimentalni i teorijski rezultati bliže ili dalje budućnosti će pokazati da li su kvantni čisti ansambli u stvari subkvantni mešani (nehomogeni) ansambli (kako god da se jednog dana definiše pojam "subkvantnog") ili ne; drugim rečima, da li je kvantno čisto stanje kvantnog objekta samo za kvantnog fizičara maksimalno poznato stanje, a u stvari odgovara nepotpunom poznavanju sistema (kao što je slučaj u klasičnoj statističkoj fizici) ili je to maksimalno određeno stanje kvantnog sistema kako to leži u prirodi stvari.

2.1.2 Postulat o stanjima

Prvi zadatak kvantne mehanike sastoji se u tome da definiše entitete koji će teorijski korespondirati čistom stanju datog kvantnog sistema.

Moramo se zapitati šta se zapravo očekuje od jednog entiteta pomoću kojega je statistički ansambl "zadat", tj. koji teorijski korespondira ansamblu. Odgovor proizlazi iz našeg pregleda statističkih pojmova (§ 1.4): Za *svaku* stohastičku varijablu Z koja može da se meri na svim objektima ansambla mora da se iz dotičnog entiteta može izračunati distribucija verovatnoće po mogućim vrednostima od Z.

Setimo se linearne polarizacije i pretpostavimo za trenutak da se jedino linearna polarizacija može meriti na ansamblu fotona. Onda, kao što smo videli u § 1.3.3, entitet koji opisuje čisti ansambl linearno polarizovanih fotona npr. duž orta $\mathbf{O}(\frac{\pi}{4})$ je sam taj ort, jer njegov kvadrat projekcije daje verovatnoću. Videli smo u § 1.3.4 da se, pri uzimanju u obzir i nelinearnih polarizacionih fenomena, unutrašnje stanje fotona izražava ortom u kompleksnom linearnom prostoru. U opštem slučaju u tu svrhu služi jedan kompleksni Hilbert-ov prostor $\mathcal{H}$, koji se naziva *prostorom stanja* zadatog kvantnog sistema. Kako se ovaj prostor definiše u slučaju jedne i više čestica, videćemo u odeljcima § 2.5 i § 2.6. Sada ćemo pretpostaviti da je $\mathcal{H}$ već zadat.

Pre nego što koncizno formulišemo prvi postulat, podsetimo se još da se stanje fotona koje se sastoji u linearnoj polarisanosti duž x-ose npr. može tačno izraziti ortom $\mathbf{x}_0$. Lako je videti da bi ort $-\mathbf{x}_0$ isto tako dobro poslužio, jer daje iste kvadrate projekcija. Dakle, imamo dvoznačnost u izboru orta koji će definisati pravac realne x-ose. U opštem slučaju u kvantnoj mehanici stanje

---

[2.1.2] Ekvivalentni mogu biti samo ansambli kvantnih sistema iste vrste (inače bi se bar nekim merenjem razlikovali).

predstavlja vektor u $\mathcal{H}$ jedinične norme ili, kao što se obično kaže, normirani vektor (uopštenje pojma realnog orta), ali u stvari opet se radi o jednodimenzionalnom potprostoru ili pravcu koji dotični vektor definiše u $\mathcal{H}$. Stoga imamo višeznačnost u izboru entiteta koji odgovara čistom stanju: zajedno sa $\psi \in \mathcal{H}$ ($\|\psi\| = 1$, "$\| \dots \|$" označava normu vektora) i $e^{\imath\lambda}\psi$, gde je λ bilo koji realan broj, predstavlja isto stanje kvantnog sistema. Ova nejednoznačnost u izboru ψ izražava se obično rečima: vektor stanja ψ je određen s tačnošću do proizvoljnog faznog faktora (tj. do $e^{\imath\lambda}$), ili rečima: vektor stanja ima otvoren fazni faktor.

I POSTULAT O STANJIMA

Svako stanje kvantnog sistema predstavlja se u kvantnoj mehanici nekim vektorom jedinične norme u prostoru stanja $\mathcal{H}$ dotičnog sistema, i obratno, svaki vektor jedinične norme iz $\mathcal{H}$ u principu predstavlja neko moguće stanje dotičnog kvantnog sistema. Pri tome dva vektora jedinične norme koja se razlikuju samo za fazni faktor predstavljaju isto stanje, i obratno, samo takva dva vektora predstavljaju jedno te isto stanje.

Na osnovu obostrano jednoznačne veze između fizičkih stanja kvantnog sistema i normiranih vektora u $\mathcal{H}$ (s tačnošću do otvorenog faznog faktora), koju uspostavlja I Postulat, nećemo terminološki razlikovati stanje i normirani vektor (koji ga predstavlja), tj. kad god kažemo "stanje", izrazićemo to[2.1.3] sa $\psi \in \mathcal{H}$, $\langle \psi \mid \psi \rangle = 1$. Naravno, treba stalno imati na umu da "stanje" znači čisto stanje, a ovo u stvari znači pripadnost kvantnog sistema određenom homogenom kvantnom ansamblu.

Postulat o stanjima je u neku ruku preciznija i potpunija formulacija *principa superpozicije*. Naime, iz ovog postulata sledi sledeći iskaz: ako znamo da kvantni sistem može biti u stanjima $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_K$ (normirani vektori), onda može biti i u stanju $c(a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \dots + a_K\psi_K)$, gde su a_k, $k = 1, 2, \dots, K$ *proizvoljni* kompleksni brojevi, a c je konstanta normiranja. A ovaj iskaz u stvari izražava princip superpozicije i interferenciju (videti niže u paragrafu § 2.1.8).

U formulaciji Postulata I nešto je moralo ostati nedorečeno. Naime, nije iskazano kako se ostvaruje korespondencija $\psi \leftrightarrow$ "homogeni kvantni ansambl". Ovu ćemo prazninu popuniti kasnije u paragrafu § 2.4.6, kada budemo imali izvestan broj, za to neophodnih, pojmova i rezultata.

2.1.3 Postulat o opservablama

Raščistivši šta su teorijski entiteti koji odgovaraju čistim ansamblima kvantnih sistema tek smo rešili problem početnog uslova, koji se, kao što smo rekli, naziva preparacijom početnog ansambla. Dakle, kad eksperimentator na neki način preparira čisti ansambl u laboratoriji, teoretičar tome na hartiji (ili tabli) korespondira normiran vektor $\psi \in \mathcal{H}$.

Kao što smo videli u našim tipičnim kvantnim eksperimentima (§ 1.1 i § 1.2), ansambl kvantnih objekata se po izboru eksperimentatora dovodi u interakciju sa nekim klasičnim mernim uređajem kako bi kvantni objekti ispoljili ono što smo nazivali kvantno ponašanje. Sada treba

[2.1.3] Vektore stanja pisaćemo i samo simbolima, recimo ψ, i kao Dirac-ove ketove $\mid \psi \rangle$. Bez opomene preskakaćemo s jedne notacije na drugu (prećutno pretpostavljajući da imamo samo jedno $\mathcal{H}$). Tako će se čitalac navići na ovu dvojezičnost, što je veoma poželjno jer se oba jezika obilno koriste u literaturi.

da precizno formulišemo šta se uopšte može meriti u kvantnoj fizici, drugim rečima, šta su stohastičke varijable kvantne mehanike.

II POSTULAT O OPSERVABLAMA

Svaku stohastičku varijablu kvantnog sistema, tj. svaku tzv. opservablu, predstavlja neki hermitski operator u prostoru stanja $\mathcal{H}$ sistema i obratno, svaki hermitski operator u $\mathcal{H}$ predstavlja neku opservablu koju u principu možemo da merimo. Pri tome različite stohastičke varijable predstavljaju različiti operatori i obratno, različiti operatori uvek odgovaraju različitim varijablama.

Na osnovu obostrano jednoznačne veze iz Postulata II nećemo terminološki razlikovati opservable i hermitske operatore u $\mathcal{H}$.

U poslednje vreme neki istraživači u oblasti zasnivanja kvantne mehanike pokušavaju da gornju formulaciju Postulata II zamene opreznijom, u kojoj se skup svih stohastičkih varijabli kvantne mehanike biunivoko relira sa jednim (nedefinisanim) pravim podskupom skupa svih hermitskih operatora u $\mathcal{H}$. To omogućuje da se neki (sa gledišta fizike) patološki slučajevi hermitskih operatora ni u principu ne osmišljavaju fizički. Ali nemogućnost da se definiše pomenuti podskup "prihvatljivih" operatora čini ceo pokušaj još nedovoljno zrelim. Kvantna mehanika, kao i svaka druga oblast teorijske fizike, iziskuje zatvorenost matematičkog aparata sa kojim radi. Zato se naša formulacija Postulata II koristi skupom svih hermitskih operatora.

Videćemo u paragrafu § 2.5.7 da su opservable od velikog značaja za određivanje prostora stanja.

Kada u odeljku § 2.4 budemo shvatili da opservable mogu biti kompatibilne i nekompatibilne i kada u odeljcima § 4.1 i § 4.2 izvedemo iz nekompatibilnosti relacije neodređenosti, onda ćemo videti da činjenica da se stohastičke varijable u kvantnoj mehanici predstavljaju upravo hermitskim operatorima u $\mathcal{H}$ u stvari na precizan i opšti način iskazuje *princip neodređenosti*, koji smo kvalitativno diskutovali u odeljku § 1.2.

2.1.4 Spektralna forma hermitskog operatora

Kao što smo videli na primeru naših tipičnih eksperimenata, meri se u stvari raspodela verovatnoće (u našim primerima raspodela verovatnoće padanja fotona po dužini zastora). Ova raspodela mora da zavisi kako od stanja kvantnog objekta, tako i od opservable koju merimo. Moramo se zapitati kakve veze imaju hermitski operatori sa raspodelom verovatnoće po realnoj osi, ili bar sa samom realnom osom.

Matematički podsetnik

Hermitski operator $\hat{A}$ ima svoj domen definisanosti $\mathcal{D}_{\hat{A}} \subset \mathcal{H}$. Skup $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ može biti ceo prostor $\mathcal{H}$. Ako je $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ pravi podskup, onda je to lineal gust u $\mathcal{H}$. To znači da je skup $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ zatvoren na formiranje bilo koje linearne kombinacije i da se svaki element $\mathcal{H}$ može proizvoljno tačno aproksimirati nekim elementom iz $\mathcal{D}_{\hat{A}}$. (Skup racionalnih brojeva je npr. gust na realnoj osi, ali

nije lineal.) Za svaka dva vektora $\psi, \varphi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}$ važi $(\hat{A}\psi, \varphi) = (\psi, \hat{A}\varphi)$, tj. $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. Ali ovo je samo njegovo lice i ono nema neposrednog značaja za fiziku. Hermitski operator ima i svoje naličje.

Hermitski operator, pre svega, ima tačno određen diskretni spektar ili skup diskretnih svojstvenih vrednosti, tj. realnih brojeva a za koje tzv. svojstvena jednakost

$$\hat{A}\psi = a\psi \tag{2.1.1}$$

ima rešenje $\psi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}$, $\psi \neq 0$. Osim toga hermitski operator $\hat{A}$ ima i svoje svojstvene projektore koji odgovaraju pojedinim svojstvenim vrednostima. Na primer svi vektori koji zadovoljavaju (2.1.1) sa fiksiranom vrednošću a, čine potprostor, tzv. svojstveni potprostor od $\hat{A}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti a. Projektor na ovaj potprostor je tzv. svojstveni projektor $\hat{P}_a(\hat{A})$, za koji se takođe kaže da odgovara ili da pripada svojstvenoj vrednosti a.

Ako se ograničimo na operatore sa čisto diskretnim spektrom, onda se hermitski operator u svojoj *spektralnoj formi* piše u vidu

$$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n(\hat{A}), \tag{2.1.2}$$

gde su a_n različite svojstvene vrednosti (one su uvek realne), a $\hat{P}_n(\hat{A})$ su odgovarajući svojstveni projektori. Oni daju razlaganje jedinice, ortogonalni su i idempotentni:

$$\sum_n \hat{P}_n(\hat{A}) = \hat{I}, \quad \hat{P}_m(\hat{A})\hat{P}_n(\hat{A}) = \delta_{mn}\hat{P}_m(\hat{A}), \quad \forall m, n \tag{2.1.3a}$$

(I, identični operator u $\mathcal{H}$, deluje isto kao množenje sa 1). Broj sabiraka u (2.1.2) i (2.1.3) je konačan ili najviše prebrojivo beskonačan[2.1.4].

Hermitski operator $\hat{A}$ preko svojih svojstvenih projektora definiše tzv. *spektralnu meru* svakog intervala na realnoj osi. Na primer zatvorenom intervalu $[a, b]$ odgovara kao spektralna mera projektor (koji zavisi od opservable $\hat{A}$):

$$\hat{P}_{[a,b]}(\hat{A}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{a_n \in [a,b]} \hat{P}_n(\hat{A}). \tag{2.1.4}$$

Dakle, sumira se po onim svojstvenim projektorima čije odgovarajuće svojstvene vrednosti pripadaju dotičnom intervalu. Ako takvih nema, podrazumeva se da je spektralna mera nula. Za poluzatvorene, poluotvorene i otvorene intervale spektralna mera se definiše analogno sa (2.1.4).

Ukoliko se iz konteksta podrazumeva za koji hermitski operator $\hat{A}$ se navodi svojstveni projektor ili spektralna mera, oznaka $\hat{A}$ se izostavlja i piše samo $\hat{P}_n$, tj. $\hat{P}_{[a,b]}$.

2.1.5 Postulat o verovatnoći rezultata

Pošto smo se podsetili da hermitski operator ima veze sa realnom osom preko svoje spektralne mere, možemo da pristupimo formulaciji narednog postulata, koji ima najveću praktičnu važnost.

[2.1.4] To je posledica činjenice da je $\mathcal{H}$ najviše prebrojivo beskonačno dimenzionalan u kvantnoj mehanici. (Može se pokazati da je to ekvivalentno zahtevu da je $\mathcal{H}$ separabilan, tj. da sadrži najviše prebrojiv podskup koji je gust u $\mathcal{H}$.)

III POSTULAT O VEROVATNOĆI REZULTATA

Verovatnoća da se, pri merenju opservable $\hat{A}$ na kvantnom sistemu u stanju ψ, dobije rezultat koji leži u unapred zadatom intervalu $[a, b]$, jednaka je kvadratu norme projekcije od ψ spektralnom merom dotičnog intervala definisanom sa $\hat{A}$, tj.

$$\boxed{v([a,b],\hat{A},\psi) = \|\hat{P}_{[a,b]}\psi\|^2}. \tag{2.1.5}$$

Naravno, u iskazu Postulata III umesto zatvorenog intervala možemo staviti bilo koji drugi od četiri moguća tipa intervala. Kako bismo proučili šta zapravo znači ovaj postulat, izvešćemo nekoliko njegovih neposrednih posledica.

2.1.6 Verovatnoća određene vrednosti opservable

Korolar 2.1.1 *Verovatnoća da se dobije diskretna svojstvena vrednost a_n kao rezultat merenja opservable $\hat{A}$ na kvantnom sistemu u nekom stanju ψ jednaka je kvadratu norme projekcije od ψ u svojstveni potprostor koji odgovara svojstvenoj vrednosti a_n, tj.*

$$v(a_n,\hat{A},\psi) = \|\hat{P}_n\psi\|^2. \tag{2.1.6}$$

Dokaz: Očigledna posledica od (2.1.5) i (2.1.4) ako se uzme interval $[a_n, a_n]$. *Q. E. D.*

Korolar 2.1.2 *Verovatnoća da se dobije rezultat a koji nije diskretna svojstvena vrednost od $\hat{A}$ pri merenju opservable $\hat{A}$ na kvantnom sistemu u stanju ψ je nula.*

Dokaz: Odmah sledi iz činjenice što je u ovom slučaju $\hat{P}_a = \hat{P}_{[a,a]} = 0$. *Q. E. D.*

Čitalac se lako može uveriti da iskazi Korolara K 2.1.1 i K 2.1.2, sa svoje strane, imaju za posledicu iskaz Postulata III. Očigledno, ima više načina kako se osnovni postulati mogu formulisati, razni autori to čine na različite načine. Naš Postulat III ima prednost velike opštosti. Videćemo u odeljku § 2.3 da se odmah uopštava i na kontinualni deo spektra opservable[2.1.5].

2.1.7 Drugi vid formule za verovatnoću

Često se (2.1.5) koristi u sledećoj ekvivalentnoj formi:

$$v([a,b],\hat{A},\psi) = \langle\psi \mid \hat{P}_{[a,b]} \mid \psi\rangle. \tag{2.1.7}$$

Naime, desna strana (odsad: DS) od (2.1.5) daje $(\langle\psi \mid \hat{P}_{[a,b]})(\hat{P}_{[a,b]} \mid \psi\rangle) = \langle\psi \mid \hat{P}^2_{[a,b]} \mid \psi\rangle = \langle\psi \mid \hat{P}_{[a,b]} \mid \psi\rangle$, jer svaki projektor je ne samo hermitski nego i idempotentan.

[2.1.5]Kao što je čitaocu sigurno jasno, naše postulate ne krasi vrlina iskazne minimalnosti kako je to slučaj sa aksiomima u matematici. U fizici se ova osobina redovno žrtvuje radi postizanja jasnoće i opštosti fizičkog sadržaja.

Analogno, (2.1.6) može da se prepiše kao

$$\boxed{v(a_n, \hat{A}, \psi) = \langle \psi \mid \hat{P}_n \mid \psi \rangle}. \tag{2.1.8}$$

Ako je $\hat{B}$ hermitski operator, a ψ vektor stanja jedinične norme, onda se izraz $\langle \psi \mid \hat{B} \mid \psi \rangle$ naziva *očekivanom* ili *srednjom vrednošću* opservable $\hat{B}$. Smisao ovog naziva postaće nam jasan u § 2.2.8. Zasad je dovoljno da kratko možemo reći da je verovatnoća intervala jednaka očekivanoj vrednosti spektralne mere tog intervala.

Ako je svojstveni potprostor koji odgovara diskretnoj svojstvenoj vrednosti a_n opservable $\hat{A}$ jednodimenzionalan, tj. ako je, kao što se kaže, a_n *nedegenerisana* svojstvena vrednost, onda a_n jednoznačno (s tačnošću do faznog faktora) određuje svojstveni vektor $\mid \varphi_n \rangle$ jedinične norme i (2.1.8) (ili (2.1.6)) se svodi na

$$\boxed{v(a_n, \hat{A}, \psi) = |\langle \varphi_n \mid \psi \rangle|^2}, \tag{2.1.9}$$

jer $\hat{P}_n = \mid \varphi_n \rangle \langle \varphi_n \mid$.

Slučaj degenerisane svojstvene vrednosti a_n ćemo proučiti detaljnije u drugom paragrafu sledećeg odeljka i tamo ćemo svesti (2.1.8) na praktičniju formu.

2.1.8 Interferencija

Neka je ψ superponirano (koherentno pomešano) stanje $\psi = \sum_{i=1}^{K} a_i \psi_i$, gde su ψ_i ortonormirani vektori i $\sum_i |a_i|^2 = 1$ da bismo imali $\langle \psi \mid \psi \rangle = 1$ (uporediti pretposlednji pasus u paragrafu § 2.1.2). Iz (2.1.7) sledi

$$v([a,b], \hat{A}, \psi) = \sum_i |a_i|^2 \sum_j a_i^* a_j \langle \psi_i \mid \hat{P}_{[a,b]} \mid \psi_j \rangle = \sum_i v([a,b], \hat{A}, \psi_i) + \sum_{i \neq j} a_i^* a_j \langle \psi_i \mid \hat{P}_{[a,b]} \mid \psi_j \rangle. \tag{2.1.10}$$

Poslednji izraz je tzv. *interferentni sabirak*; ako je on različit od nule (i samo u tom slučaju) imamo interferenciju (koherentni efekat) stanja ψ_i, $i = 1, 2, ..., K$.

U eksperimentu sa dva otvora i u eksperimentu sa poluposrebrenim ogledalom imamo

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2, \tag{2.1.11}$$

gde ψ_1 opisuje stanje elektrona koji je stigao na drugi zastor a prošao je kroz prvi otvor (stanje fotona koji je stigao na zastor optičkom putanjom 1 odbivši se od semireflektivnog ogledala), a ψ_2 opisuje stanje elektrona koji je do drugog zastora dospeo kroz drugi otvor (stanje fotona koji se kretao optičkom putanjom 2 prošavši kroz polupropusno ogledalo). Prostornu distribuciju na drugom zastoru (duž ose x) onda daje

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_1(x)|^2 + \frac{1}{2} |\psi_2(x)|^2 + \frac{1}{2} [\psi_1^*(x) \psi_2(x) + \psi_1(x) \psi_2^*(x)] \tag{2.1.12}$$

($|\psi(x)|^2$ itd. su u stvari gustine verovatnoće u ovom slučaju, uporediti § 1.4.9).

Poslednji izraz u (2.1.12) je interferentni član bez kojeg bi (2.1.12) dalo raspodelu tipa $D_1 + D_2$ sa C 1.2 bez interferencije, a sa njim (tj. kada nije nula) daje distribuciju sa interferencijom tipa $D_{1,2}$ (na istom crtežu).

2.2 Pojedinačni sistemi i srednja vrednost opservabli

Ovaj odeljak ćemo posvetiti proučavanju kvantnih osobina ili kvantnih događaja (to se u kvantnoj mehanici svodi na isto jer oba se ispoljavaju samo u merenju). Pronaćićemo jednostavne opservable koje odgovaraju ovim fizičkim pojmovima i prodiskutovaćemo njihove osnovne osobine. Formulisaćemo jedini postulat koji se odnosi na pojedinačne kvantne sisteme. Na kraju ćemo izvesti obrazac za srednju vrednost opservable.

2.2.1 Kvantne osobine ili događaji

Videli smo u prethodnom odeljku da spektralna forma hermitskih operatora nosi fizičku interpretaciju: diskretne svojstvene vrednosti su mogući merni rezultati, a odgovarajući svojstveni projektori omogućavaju da se iz proizvoljnog stanja ψ izračunaju verovatnoće pojedinih rezultata.

Svaki projektor $\hat{P}$ u $\mathcal{H}$ je i sam opservabla i to najprostija (ako ne uzimamo u obzir realne konstante). Projektor je takoreći već napisan u spektralnoj formi:

$$\hat{P} = 1 \cdot \hat{P} + 0 \cdot (\hat{I} - \hat{P}), \tag{2.2.1}$$

gde je $\hat{I} - \hat{P}$ tzv. komplementarni projektor od $\hat{P}$, on projektuje na ortogonalni komplement potprostora na koji projektuje $\hat{P}$. Nameće se pitanje da li spektralna forma (2.2.1) ima neko specijalno značenje u kvantnoj mehanici.

Projektori se interpretiraju kao *kvantne osobine* fizičkih sistema. Naime, pri merenju opservable $\hat{P}$ mernom rezultatu 1 pripisuje se fizički smisao da kvantni sistem ima ili poseduje kvantnu osobinu $\hat{P}$, a merni rezultat 0 tumači se tako da sistem "ne poseduje" ovu osobinu.

Da bismo našli ilustracije za kvantne osobine, vratimo se našim prostim primerima kvantnih pojava. Linearna polarisanost fotona duž x-ose je, na primer, jedna kvantna osobina. Pošto je unutrašnji prostor stanja fotona dvodimenzionalan (uporediti § 1.3.3), komplementarna kvantna osobina $\hat{I} - \hat{P}$ ima takođe prost fizički smisao: to je polarisanost duž y-ose. Analogno stoje stvari pri prolasku fotona kroz semireflektivno ogledalo: odbijeni foton ima, recimo, kvantnu osobinu $\hat{P}$, a foton koji je prošao ima komplementarnu kvantnu osobinu $\hat{I} - \hat{P}$.

Malo je složenija situacija kada foton stiže do prvog zastora u eksperimentu difrakcije elektrona kroz dva otvora. Ovde postoje tri kvantne osobine: prvu od njih poseduje foton kada je prošao kroz otvor 1, drugu kada je prošao kroz otvor 2, a treću osobinu je (retrospektivno) imao foton koji je udario u zastor. Ako je $\hat{P}$ prva osobina, onda $\hat{I} - \hat{P}$ izražava drugu i treću zajedno.

Često se izložena interpretacija mernog rezultata 1 za projektor $\hat{P}$ kao posedovanja određene kvantne osobine zamenjuje interpretacijom istog rezultata kao *kvantnog događaja* koji se desio. $\hat{I} - \hat{P}$ onda znači da se isti događaj nije desio.

U smislu ove interpretacije, ako svojstvena vrednost 1 od $\hat{P}$ odgovara linearnoj polarizaciji fotona u pravcu x-ose, onda se kaže da se desio kvantni događaj dotične polarizacije; svojstvena vrednost 0 onda znači da se ovaj događaj nije desio ili da se desio događaj polarizacije duž y-ose (komplementarni događaj). Čitalac će bez teškoća sam prevesti ostala dva primera sa jezika kvantnih osobina na ekvivalentni jezik kvantnih događaja.

Postoji i treći ekvivalentni jezik: jezik *kvantne logike*. Tu se govori o *istinitosti* ili neistinitosti *iskaza*, a iskaz sadrži osobine ili događaje.

2.2.2 Svojstveni problem projektora

Radi povećanja naših operativnih mogućnosti sa projektorima, dokažimo dve leme.

Lema 2.2.1 *Za svaki projektor $\hat{P}$ sledeće dve svojstvene jednakosti su ekvivalentne:*

$$\hat{P}\psi = \psi \quad \Leftrightarrow \quad (\hat{I} - \hat{P})\psi = 0 \tag{2.2.2}$$

(na desnim stranama smo izostavili 1 odnosno ψ).

Dokaz je očigledan.

Lema 2.2.2 *Ako je $\hat{P}_n$ svojstveni projektor opservable $\hat{A}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti a_n, a opservabla ima čisto diskretan spektar, onda su sledeće dve svojstvene jednakosti ekvivalentne:*

$$\hat{A}\psi = a_n\psi \quad \Leftrightarrow \quad \hat{P}_n\psi = \psi. \tag{2.2.3}$$

Dokaz je nepotreban jer obe jednakosti u (2.2.3) iskazuju da ψ pripada svojstvenom potprostoru od $\hat{A}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti a_n.

Lema L 2.2.2 važi i za slučaj opservable koja ima i kontinualni deo spektra, tj. važi u opštem slučaju sa izuzetkom čisto kontinualnog spektra (uporediti sledeći odeljak).

Iz Leme L 2.2.2 proizlazi da se kvantni događaj sastoji ili u tome da se pri merenju opservable $\hat{P}_n$ dobije rezultat 1 ili da se pri merenju neke opservable $\hat{A}$ (čiji je $\hat{P}_n$ svojstveni projektor) dobije vrednost a_n (svojstvena vrednost od $\hat{A}$ kojoj pripada $\hat{P}_n$).

Kada imamo nedegenerisanu svojstvenu vrednost a_n opservable $\hat{A}$ (ekvivalentno: $\mathrm{Tr}\,\hat{P}_n = 1$ $\Leftrightarrow$ $\hat{P}_n$ je projektor pravca), onda govorimo o *elementarnom kvantnom događaju* (uporediti § 1.4.6 za klasični analogon). Videli smo u (2.1.9) kako glasi obrazac za verovatnoću u ovom slučaju.

Degenerisana svojstvena vrednost a_n opservable $\hat{A}$ (ekvivalentno: $\mathrm{Tr}\,\hat{P}_n > 1$) predstavlja *složen kvantni događaj*. Videli smo u (1.4.2) da se složen klasični događaj jednoznačno razlaže na elementarne događaje i da se verovatnoća složenog događaja svodi na zbir verovatnoća dotičnih elementarnih događaja. Pitamo se da li je tako i u kvantnom prostoru događaja[2.2.1].

U kvantnom slučaju složeni događaj se *nejednoznačno* razlaže na elementarne događaje: neka je $\{|\,\varphi_1\,\rangle, |\,\varphi_2\,\rangle, \ldots, |\,\varphi_N\,\rangle\}$ proizvoljan ortonormiran bazis u oblasti likova od $\hat{P}_n$ ($N \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{Tr}\,\hat{P}_n$), tj. neka

$$\hat{P}_n = \sum_{i=1}^{N} |\,\varphi_i\,\rangle\langle\varphi_i\,|\,. \tag{2.2.4}$$

Zamenjujući (2.2.4) u (2.1.8) dobijamo

$$\boxed{v(a_n, \hat{A}, \psi) = \sum_{i=1}^{N} |\langle\,\varphi_i\mid\psi\rangle|^2} \tag{2.2.5}$$

kao uopštenje od (2.1.9) na složeni događaj i kao kvantni analogon od (1.4.2). Naravno, izbor pomenutog podbazisa je nejednoznačan.

[2.2.1] Kvantni prostor događaja je u stvari skup svih projektora u $\mathcal{H}$. I to je parcijalno uređen skup (kao i u klasičnom slučaju), ali nije Bool-ova algebra, već ima drugačiju strukturu.

2.2.3 Oštra vrednost i svojstveni problem opservable

Postulat III ima još dve važne neposredne posledice.

Korolar 2.2.1 *Ako je vektor stanja ψ svojstveni vektor opservable $\hat{A}$ koji pripada svojstvenoj vrednosti a_n, onda kvantni sistem u ansamblu koji ψ opisuje ima oštru vrednost a_n.*

Dokaz: Iz $\hat{A}\psi = a_n\psi$, $||\psi|| = 1$ i (2.2.3) sledi $||\hat{P}_n\psi|| = 1$, što na osnovu K 2.1.1 znači da je $v(a_n, \hat{A}, \psi) = 1$, tj. vrednost a_n je stohastički sigurna. *Q. E. D.*

Korolar 2.2.2 *Ako u stanju ψ kvantni sistem ima oštru vrednost a_n opservable $\hat{A}$, onda je ψ svojstveni vektor od $\hat{A}$ koji odgovara diskretnoj svojstvenoj vrednosti a_n.*

Dokaz: Neka Poznato je da u opštoj nejednakosti $||\hat{P}\psi|| \leq ||\psi||$ važi jednakost ako i samo ako je $\hat{P}\psi = \psi$. Mi imamo $v(a_n, \hat{A}, \psi) = ||\hat{P}\psi||^2 = 1$ i $||\psi||^2 = 1$. Stoga, iz (2.2.3) sledi navedeni iskaz. *Q. E. D.*

Mi smo u stvari dokazali iskaze Korolara K 2.2.1 i K 2.2.2 samo za opservable $\hat{A}$ koje imaju samo diskretne svojstvene vrednosti. U sledećem odeljku ćemo videti da se pomenuti dokazi neposredno proširuju na opšti slučaj opservable (koja može da ima i kontinualan spektar).

2.2.4 Postulat o pojedinačnim kvantnim sistemima

Već smo više puta imali slučaj stohastičke sigurnosti ili stohastičke nemogućnosti. Moramo se zapitati ne radi li se tu zapravo uvek o apsolutnoj sigurnosti, odnosno nemogućnosti (uporediti § 1.4.6), što bi nam omogućilo da govorimo o pojedinačnim kvantnim sistemima umesto o ansamblu. U stvari to je tačno u kvantnoj mehanici.

IV POSTULAT O POJEDINAČNIM KVANTNIM SISTEMIMA

Ako je verovatnoća da se dobije rezultat iz intervala $[a, b]$ pri merenju opservable $\hat{A}$ u stanju ψ jednaka jedinici, onda svaki pojedinačni sistem u tom stanju nužno daje dotični rezultat, tj.

$$v([a, b], \hat{A}, \psi) = 1 \;\Leftrightarrow\; \text{rezultat} \in [a, b] \text{ apsolutno sigurno.} \tag{2.2.6}$$

Naš Postulat IV nije uobičajen u literaturi, mada mnogi autori prećutno prave ekvivalentnu pretpostavku. Zahvaljujući ovom postulatu kvantna mehanika nije potpuno statistička nauka.

Saglasnost teorije sa eksperimentalnim činjenicama postigla bi se, naravno, i bez ovog Postulata. Naš motiv da ga formulišemo eksplicitno proističe iz sledeća dva razloga:

i) Iako svaka statistička teorija (dakle i kvantna mehanika) verovatnoće pridružuje neograničeno velikim ansamblima (jer verovatnoća je granična vrednost relativne frekvencije), u praksi imamo samo konačne ansamble, sa ograničenim brojem elemenata. Naime, ne možemo broj kvantnih sistema N u ansamblu da uzimamo proizvoljno velikim. Zbog toga je poželjno da teorija što više kaže na jeziku konačnih ansambala. Stohastički siguran ali ne i apsolutno siguran događaj se na jeziku ograničenih konačnih ansambala ne može definisati (uporediti § 1.4.6), tj. ne može se razlikovati od praktično sigurnog događaja (za koji je $1 - v(a_n) \leq \varepsilon$, ε vrlo mali broj).

ii) Poželjno je da teorija što više kaže o pojedinačnim fizičkim sistemima; ansambli su nužno zlo a ne cilj kome se teži.

2.2.5 Apsolutna nemogućnost i pojedinačni kvantni sistemi

Postulat IV ima kao neposrednu posledicu analogan iskaz poistovećenja stohastičke i apsolutne nemogućnosti.

Korolar 2.2.3 *Ako je verovatnoća da se dobije rezultat iz intervala $[a,b]$ pri merenju opservable $\hat{A}$ u stanju ψ jednaka nuli, onda svaki pojedinačni kvantni sistem u tom stanju nužno daje rezultat koji je van tog intervala, tj.*

$$v([a,b],\hat{A},\psi)=0 \quad \Leftrightarrow \quad \text{rezultat} \notin [a,b] \text{ apsolutno sigurno.} \tag{2.2.7}$$

Dokaz: Događaji $D_1 \stackrel{\text{def}}{=}$ "rezultat spada u interval $[a,b]$" i $D_2 \stackrel{\text{def}}{=}$ "rezultat spada u uniju intervala $(-\infty,a)$ i $(b,+\infty)$" su disjunktni i događaj koji se sa "ili" dobija iz njih je siguran događaj $S \stackrel{\text{def}}{=}$"rezultat pripada realnoj osi". Stoga se verovatnoće događaja D_1 i D_2 sabiru u jedinicu (videti (1.4.2) i pasus ispod toga), što usled $v(D_1)=0$ daje $v(D_2)=1$. Na osnovu Postulata IV na svakom kvantnom sistemu u ansamblu koji odgovara vektoru ψ događaj D_2 mora da se desi, a samim tim D_1 ne može da se desi. *Q. E. D.*

2.2.6 Oštra vrednost opservable — puno značenje

Naoružani Postulatom IV, njegovim blizancem Korolarom K 2.2.3 kao i Korolarima K 2.2.1 i K 2.2.2, sad možemo da iskažemo u čemu je fizički smisao Lema L 2.2.1 i L 2.2.2.

Svih 9 sledećih iskaza su uzajamno ekvivalentni:

a) Na jeziku ansambala:
Kvantni ansambl opisan sa ψ ima oštru vrednost

- a.1) a_n opservable $\hat{A}=\sum_{n'} a_{n'}\hat{P}_{n'}$;
- a.2) 1 opservable $\hat{P}_n$;
- a.3) 0 opservable $(\hat{I}-\hat{P}_n)$;

b) Na jeziku pojedinačnih sistema:
Sistem u stanju ψ

- b.1) apsolutno sigurno daje rezultat a_n pri merenju opservable $\hat{A}$;
- b.2) ima kvantnu osobinu $\hat{P}_n$;
- b.3) nema kvantnu osobinu $(\hat{I}-\hat{P}_n)$;

c) Na jeziku formalizma:

c.1) $\hat{A}\psi=a_n\psi$; c.2) $\hat{P}_n\psi=\psi$; c.3) $(\hat{I}-\hat{P}_n)\psi=0$.

Čitalac, još nedovoljno verziran u kvantnoj mehanici, može lako da ne razlikuje iskaz "nema kvantnu osobinu $\hat{P}$" i logičku negaciju od "ima kvantnu osobinu $\hat{P}$". Veoma je važno da se to razlikuje, jer ovo je jedan od mnogih primera oštre razlike između kvantne i klasične mehanike.

Na primer, neka ψ ima nenultu projekciju kako u oblast likova[2.2.2] od $\hat{P}$, tj. u $\mathcal{R}(\hat{P})$, tako i u $\mathcal{R}(\hat{I}-\hat{P})$. Onda ne stoji da kvantni sistem ima kvantnu osobinu $\hat{P}$ (logička negacija), ali ne stoji ni to da merenje opservable $\hat{P}$ nužno daje nulu, a to je to što izražavamo rečima "sistem nema osobinu $\hat{P}$". U našem primeru linearne polarizacije fotona duž $\mathbf{O}(\frac{\pi}{4})$ (§ 1.3.3) nije tačno (imamo logičku negaciju) da foton ima osobinu polarizovanosti duž x-ose, a samo kad je u stanju linearne polarizacije duž y-ose on "nema" pomenutu osobinu (polarizovanosti duž x-ose)[2.2.3].

Kada je stanje ψ takvo da kvantni sistem niti ima neku kvantnu osobinu $\hat{P}$ niti stoji da je nema, onda se kaže da je ova kvantna osobina *latentna* u ψ (imamo superpoziciju osobina $\hat{P}$ i $(\hat{I}-\hat{P})$). Kada je u eksperimentu difrakcije elektron prolazio kroz oba otvora ili kada se foton i odbijao i prolazio kroz semireflektivno ogledalo, imali smo slučaj latentnosti obeju optičkih putanja. A kada smo merni uređaj podesili tako da smo upravo merili recimo osobinu "optički put 1" i zato nužno dobili rezultat da foton ima ili nema ovu osobinu, tada smo razarali interferenciju (inherentnu u superponiranom stanju) i latentne kvantne osobine pretvarali u eksplicitno posedovane (ili neposedovane) osobine.

2.2.7 Pojedini brojevi kao rezultati merenja

Videli smo u Korolaru K 2.1.2 da je pri merenju opservable $\hat{A}$ stohastički nemoguće dobiti tačan rezultat (tj. jedan realan broj) koji nije jedna od diskretnih svojstvenih vrednosti od $\hat{A}$. U svetlosti Korolara K 2.2.3 sad nam je jasno da u stvari stoji apsolutni iskaz, veoma fundamentalni zakon kvantne mehanike:

> Na svakom pojedinačnom kvantnom sistemu potpuno precizni rezultat merenja, tj. rezultat u vidu jednog realnog broja, može biti samo diskretna svojstvena vrednost merene opservable.

2.2.8 Srednja vrednost opservable

Proučimo sad kako se u kvantnoj mehanici izračunava srednja vrednost opservable. Podsetimo se da se *srednja vrednost* (sinonimi su prosečna vrednost i očekivana vrednost) stohastičke varijable X sa vrednostima $x_1, x_2, ...$ i sa verovatnoćama $v_1, v_2, ...$ (da se ove vrednosti dobiju u eksperimentu) izračunava po obrascu

$$\overline{X} = \sum_n v_n x_n \tag{2.2.8}$$

(uporediti § 1.4.8).

[2.2.2] Oblast likova operatora $\hat{A}$ piše se obično kao $\mathcal{R}(\hat{A})$ po engleskoj reči *range* (čitati: rejndž), koja znači: oblast likova.

[2.2.3] Zbog ovakvih svojevrsnosti od fundamentalnog značaja u kvantnoj mehanici bilo je predloga (na pr. od Reichenbach-a) da se na kvantnu mehaniku primeni polivalentna logika umesto uobičajene dvovalentne. Ovaj predlog nije usvojen jer nije nužan, a u stvari nije ni poželjan jer ionako sve što hoćemo da razumemo moramo na kraju izraziti dvovalentnom logikom.

Pretpostavimo da opservabla $\hat{A}$ ima čisto diskretan spektar $a_1, a_2, ...$ i spektralnu formu

$$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n. \tag{2.2.9}$$

Pitamo se kako najprostije izračunati srednju vrednost ovakve opservable u nekom stanju.

Teorem 2.2.1 *Srednja vrednost opservable $\hat{A}$ sa čisto diskretnim spektrom u stanju ψ je*

$$\boxed{\langle\, \hat{A}\, \rangle_\psi = \langle \psi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle}. \tag{2.2.10}$$

Dokaz: Obrazac (2.2.8) pomoću (2.1.8) daje $\langle\, \hat{A}\, \rangle_\psi = \sum_n \langle \psi \mid \hat{P}_n \mid \psi \rangle a_n$, a zahvaljujući spektralnoj formi (2.2.9) onda dolazimo do (2.2.10). *Q. E. D.*

Zadatak 2.2.1 Pokazati da je u svom svojstvenom stanju, opservabla ima srednju vrednost jednaku odgovarajućoj svojstveneoj vrednosti.

Zadatak 2.2.2 Pokazati da stanje $\mid \psi \rangle$ u kojem je disperzija opservable jednaka nuli, mora biti svojstveno stanje iste opservable.

Zadatak 2.2.3 Pokazati da je za opservablu koja je događaj ($\hat{A}$ je projektor) njena srednja vrednost u stanju $\mid \psi \rangle$ jednaka verovatnoći da će se taj događaj desiti ako se izvrši merenje tog događaja (tj. opservable $\hat{A}$).

2.3 Kontinualni spektar opservabli

Svrha ovog odeljka je da omogući uopštenje rezultata prethodna dva odeljka na opšti slučaj opservable, koja može da ima i kontinualni spektar. Što se fizike tiče, tu nema novih rezultata, ali matematički aparat za ova uopštenja je veoma složen (tačke kontinualnog spektra, uopšteni svojstveni vektori itd.). Stoga je prvi paragraf posvećen kratkom rezimeu neophodnih matematičkih pojmova, kako bi čitalac bez teškoća mogao da usvoji dotična uopštenja.

2.3.1 Matematička rekapitulacija uopštenih vektora i kontinualnog spektra

U prethodna dva odeljka postavili smo prve stubove kvantne mehanike pomoću opservabli sa čisto diskretnim spektrom. Ali to nije opšti vid hermitskog operatora u Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}$ (osim ako je konačnodimenzionalan), niti je to najšira klasa opservabli na koje nailazimo u praksi kvantne mehanike.

Matematički podsetnik

U spektar hermitskog operatora $\hat{A}$ može da spada i realan broj s za koji svojstveni problem $\hat{A}\psi = s\psi$ nema nužno nenulto rešenje ψ u $\mathcal{H}$. Naime, postoji jedan širi prostor (natprostor) od $\mathcal{H}$, koji ćemo obeležavati sa $\mathcal{U}(\mathcal{H})$, u kojem se pored vektora iz $\mathcal{H}$ pojavljuju i tzv. uopšteni vektori, koji nemaju konačnu normu. Kad s nije diskretna svojstvena vrednost, svojstvena jednakost $\hat{A}\varphi = s\varphi$ može ipak da ima rešenje u vidu uopštenog vektora $0 \neq \varphi \in \mathcal{U}(\mathcal{H})$. Tada se kaže da je s tačka iz *kontinualnog spektra* ili da je kontinualna svojstvena vrednost od $\hat{A}$.

Kao što smo rekli, natprostor $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ čak nije ni normiran prostor, jer za uopštene vektore nije definisana norma. Samo je definisan skalarni proizvod između njih i određenog skupa[2.3.1] $\mathcal{S}$ običnih vektora ψ (tj. elemenata iz $\mathcal{H}$): $\langle \varphi \mid \psi \rangle$. Naime, uopšteni vektori su u stvari neprekidne linearne funkcije (funkcionali) na tom skupu, a $\langle \varphi \mid \psi \rangle$ je upravo kompleksni broj koji φ pridružuje vektoru ψ. Kao što smo rekli, $\mathcal{U}(\mathcal{H}) \supset \mathcal{H}$, jer kako god odabrali vektor $\chi \in \mathcal{H}$, linearni funkcional $\langle \chi \mid \psi \rangle$, (tj. skalarni proizvod u $\mathcal{H}$) je definisan za sve vektore ψ na pomenutom skupu $\mathcal{S}$.

Za tačku kontinualnog spektra s postoje sve mogućnosti degeneracije isto kao za tačke diskretnog spektra. Mi ćemo ipak jednostavnosti radi *pretpostaviti* da *uopšteni svojstveni vektori* sa kojima ćemo raditi odgovaraju *nedegenerisanim* svojstvenim vrednostima, tj. da svaka kontinualna svojstvena vrednost s definiše jednoznačno (s tačnošću do faznog faktora) odgovarajući uopšteni svojstveni vektor $\mid s \rangle$ kao nenulto rešenje svojstvenog problema

$$\hat{A} \mid s \rangle = s \mid s \rangle, \ \mid s \rangle \in \mathcal{U}(\mathcal{H}) \tag{2.3.1}$$

(naravno, $\mid s \rangle \notin \mathcal{H}$ i nije nužno da postoji $0 \neq \psi \in \mathcal{H}$ koji bi u (2.3.1) mogao da zameni $\mid s \rangle$). Osim toga, ograničićemo se na slučajeve u kojima sve tačke kontinualnog spektra pripadaju *jednom intervalu*, koji ćemo pisati u vidu $[p, t]$ (mogao bi biti i interval drugog tipa), jer se obično u kvantnoj mehanici ne pojavljuju složeniji slučajevi.

Neka za diskretni spektar opservable $\hat{A}$ $\{a_n\} \stackrel{\text{def}}{=} \{a_n \mid n = 1, 2...\}$ važi analogna pretpostavka nedegenerisanosti svih svojstvenih vrednosti a_n, ili, kao što se to još kaže, pretpostavka *prostog spektra*. Onda su svojstveni projektori $\hat{P}_n$ projektori pravaca $\hat{P}_n =\mid n \rangle\langle n \mid$, gde su $\mid n \rangle$ odgovarajući svojstveni vektori: $\hat{A} \mid n \rangle = a_n \mid n \rangle$ i to ortonormirani, tj. $\langle n \mid n' \rangle = \delta_{nn'}$.

Pretpostavimo sad da ista opservabla $\hat{A}$ pored diskretnog spektra $\{a_n\}$ ima i kontinualni spektar $[p, t]$. To znači da $\hat{A}$ ima pored diskretnog svojstvenog podbazisa $\{\mid n \rangle \mid n = 1, 2, ...\}$ i kontinualni svojstveni podbazis $\{\mid s \rangle \mid s \in [p, t]\}$ sastavljen iz uopštenih svojstvenih vektora.

Uopštenje linearnih kombinacija običnih vektora su *integrali uopštenih vektora* $\int_a^b \psi(s) \mid s \rangle \, \mathrm{d}s$, $p \leq a < b \leq t$, koji pod uslovom kvadratne integrabilnosti po modulu:

$$\int_a^b |\psi(s)|^2 \, \mathrm{d}s < +\infty \tag{2.3.2}$$

[2.3.1] Prostor $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ naziva se i opremljenim Hilbert-ovim prostorom (*rigged Hilbert space* na engleskom, *оснащенное Гильбертово пространство* na ruskom). Pomenuti pravi podskup $\mathcal{S}$ od $\mathcal{H}$, na kome se uopšteni vektori definišu kao linearne funkcije, je od presudnog značaja pri "opremanju" Hilbert-ovog prostora $\mathcal{H}$. Da je to ceo $\mathcal{H}$, dobili bismo tzv. dualni prostor od $\mathcal{H}$, koji je izomorfan sa $\mathcal{H}$. Ovako se dobija pravi natprostor $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ dualnog prostora (a ovaj se preko izomorfizma poistovećuje sa $\mathcal{H}$). Dakle, imamo s tačnošću do izomorfizama: $\mathcal{S} \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{U}(\mathcal{H})$.

i samo pod tim uslovom pripadaju Hilbert-ovom prostoru:

$$\int_a^b \psi(s) \mid s\,\rangle\, \mathrm{d}s \in \mathcal{H}. \tag{2.3.3}$$

Nas će, naravno, zanimati samo integrali koji zadovoljavaju (2.3.2). Postoji i pojam uopštenih projektora pravaca $\mid s\,\rangle\langle s\mid,\ \forall s \in [p,t]$, čiji analogni integrali daju spektralne mere intervala $[a,b]$ po kontinualnom spektru opservable $\hat{A}$:

$$\hat{P}^{(k)}_{[a,b]} \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b \mid s\,\rangle\, \mathrm{d}s \langle s\mid\,, \quad \forall [a,b] \subseteq [p,t]. \tag{2.3.4}$$

Leva strana (odsad LS) od (2.3.4) je projektor u $\mathcal{H}$.

Ako uzmemo proizvoljan vektor $\mid \psi\,\rangle \in \mathcal{H}$ i projektujemo ga sa $\hat{P}^{(k)}_{[a,b]}$, onda ćemo dobiti

$$\hat{P}^{(k)}_{[a,b]} \mid \psi\,\rangle = (\int_a^b \mid s\,\rangle\, \mathrm{d}s \langle s\mid) \mid \psi\,\rangle = \int_a^b (\langle\, s \mid \psi\rangle) \mid s\,\rangle\, \mathrm{d}s; \tag{2.3.5}$$

ili ako obeležimo $\langle\, s \mid \psi\rangle$ sa $\psi(s)$, kao što se obično čini,

$$\hat{P}^{(k)}_{[a,b]} \mid \psi\,\rangle = \int_a^b \psi(s) \mid s\,\rangle\, \mathrm{d}s, \tag{2.3.6}$$

što daje geometrijski smisao u $\mathcal{H}$ gornjim integralima (2.3.3) uopštenih vektora $\mid s\rangle$. Kompleksni brojevi $\psi(s)$ nazivaju se *koeficijentima razvoja* (razvojnim koeficijentima) ili Fourier-ovim koeficijentima vektora $\mid \psi\rangle$ po kontinualnom podbazisu $\{\mid s\rangle \mid a \leq s \leq b\}$ u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$. Videli smo u (2.3.4) da ovaj podbazis preko integrala obrazuje potprostor $\mathcal{R}(\hat{P}^{(k)}_{[a,b]}) \subseteq \mathcal{H}$, u koji $\hat{P}^{(k)}_{[a,b]}$ projektuje sve vektore iz $\mathcal{H}$.

Ako je $\int_p^t (\langle\, s \mid \psi\rangle) \mid s\,\rangle\, \mathrm{d}s \in \mathcal{H}$ vektor iz pomenutog skupa $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$, onda je definisano $\langle s' \mid (\int_a^b \psi(s) \mid s\,\rangle\, \mathrm{d}s),\ \forall s' \in [a,b]$ kao broj koji uopšteni vektor $\mid s'\,\rangle$ pridružuje vektoru $\int_p^t (\langle\, s \mid \psi\rangle) \mid s\,\rangle\, \mathrm{d}s \in \mathcal{S}$ i to je $\psi(s')$.

Sledeći veoma praktičnu *Dirac-ovu preskripciju*, u kvantnoj mehanici je uobičajeno da se smatra definisanom fiktivna funkcija dve promenljive:

$$\boxed{\langle\, s' \mid s\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \delta(s'-s), \quad s, s' \in [p,t]}. \tag{2.3.7}$$

To je tzv. Dirac-ova *delta funkcija*, koja se zamišlja kao nula za $s' \neq s$, a za $s' = s$ da je beskonačna i to "toliko jako beskonačna" da kada dođemo do $\langle s' \mid (\int_p^t \psi(s) \mid s\,\rangle\, \mathrm{d}s) = \int_p^t \psi(s)\langle\, s' \mid s\rangle\, \mathrm{d}s = \int_a^b \psi(s)\delta(s'-s)\, \mathrm{d}s$ važi[2.3.2]:

$$\boxed{\int_p^t \psi(s)\delta(s'-s)\, \mathrm{d}s \stackrel{\text{def}}{=} \psi(s')}, \tag{2.3.8}$$

tj., kao što se kaže, da delta funkcija izbacuje vrednost podintegralne funkcije u fiksiranoj tački.

[2.3.2] U kvantnoj mehanici je uobičajeno da se potpuno ignoriše skup $\mathcal{S}$, tj. da se postupa kao da $\mathcal{S} = \mathcal{H}$, tj. uzima se da (2.3.8) važi za svaki $\int_p^t \psi(s) \mid s\rangle\, \mathrm{d}s \in \mathcal{H}$. Motiv pojednostavljenja (eliminacijom nebitnog), koji je imperativ u ovako složenoj materiji, navodi fizičare na matematičku nerigoroznost.

Dakle, *uopšteni svojstveni vektori su ortonormirani na delta funkciju*, što će reći da važi (2.3.7). Uopšteni projektori pravaca zadovoljavaju

$$\int_p^t \mid s\rangle \, \mathrm{d}s\langle s \mid = \hat{P}^{(k)}_{[p,t]}, \quad \mid s\rangle\langle \, s \mid s'\rangle\langle s' \mid = \delta(s-s') \mid s\rangle\langle s \mid . \qquad (2.3.9a,b)$$

Diskretnom spektru $\{a_n\}$ opservable $\hat{A}$ odgovara spektralna mera (određena sa $\hat{A}$):

$$\sum_n \mid n\rangle\langle n \mid = \hat{P}_{\{a_n\}}, \qquad \mid n\rangle\langle \, n \mid n'\rangle\langle n' \mid = \delta_{nn'} \mid n\rangle\langle n \mid, \qquad (2.3.10a,b)$$

u punoj analogiji (ili paralelnosti) sa (2.3.9).

Projektori $\hat{P}_{\{a_n\}}$ i $\hat{P}^{(k)}_{[p,t]}$ su uzajamno komplementarni[2.3.3]:

$$\hat{P}_{\{a_n\}} + \hat{P}^{(k)}_{[p,t]} = \hat{I}. \qquad (2.3.11)$$

Na jeziku potprostora koji odgovaraju diskretnom odnosno kontinualnom spektru od $\hat{A}$, (2.3.11) se može prepisati u vidu:

$$\mathcal{H}_d \oplus \mathcal{H}_k = \mathcal{H}, \qquad (2.3.12a)$$

gde je

$$\mathcal{H}_d \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{R}(\hat{P}_{\{a_n\}}), \quad \mathcal{H}_k \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{R}(\hat{P}^{(k)}_{[p,t]}) \qquad (2.3.12b)$$

(a $\oplus$ znači da se radi o ortogonalnom zbiru potprostora).

Iz formula (2.3.11), (2.3.10a) i (2.3.9a) sledi relacija koja se u matematici naziva razlaganje jedinice:

$$\boxed{\sum_n \mid n\rangle\langle n \mid + \int_p^t \mid s\rangle \, \mathrm{d}s\langle s \mid = \hat{I}}. \qquad (2.3.13)$$

U kvantnoj mehanici relacija (2.3.13) igra veoma važnu ulogu i poznata je pod nazivom *relacija kompletnosti* ili, još češće, *relacija zatvorenosti* (engleski: *closure property*, čitati: klouže propeti). Ona (kao i (2.3.11)) pokazuje da za svaki hermitski operator postoji svojstveni bazis, čiji deo mogu činiti uopšteni vektori.

Spektralna forma hermitskog operatora $\hat{A}$ glasi:

$$\boxed{\hat{A} = \sum_n a_n \mid n\rangle\langle n \mid + \int_p^t \mid s\rangle s\langle s \mid \, \mathrm{d}s}. \qquad (2.3.14)$$

Ne treba zaboraviti da je zbir u (2.3.13) i (2.3.14) napisan pod pretpostavkom prostog spektra. Čitalac će, po potrebi, lako sam uopštiti ove jednačine radi uzimanja u obzir degeneracije pojedinih tačaka spektra.

[2.3.3] U sledećem paragrafu, u formuli (2.3.17), videćemo da spektralnoj meri proizvoljnog intervala $[a,b]$, koju pišemo $\hat{P}_{[a,b]}$ (određena je sa $\hat{A}$), doprinosi kako diskretni tako i kontinualni spektar (u opštem slučaju) i to preko svojih tačaka koje padaju u $[a,b]$. Stoga $\hat{P}_{\{a_n\}}$ u stvari jeste spektralna mera diskretnog spektra. Naime, kontinualni spektar pojedinačnim tačkama ne daje doprinose (jer se doprinos računa preko integrala). Nasuprot tome, u opštem slučaju $\hat{P}^{(k)}_{[p,t]}$ nije cela spektralna mera intervala $[p,t]$ već samo doprinos od kontinualnog spektra. Samo u slučaju kada u $[p,t]$ ne pada nijedna diskretna svojstvena vrednost, imamo $\hat{P}^{(k)}_{[p,t]} = \hat{P}_{[p,t]}$.

Primenjujući (2.3.13) na proizvoljni vektor $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}$, imamo

$$|\,\psi\,\rangle = \int_p^t \psi(s)\,|\,s\,\rangle\,\mathrm{d}s + \sum_n \psi_n\,|\,n\,\rangle, \tag{2.3.15}$$

gde su $\psi_n = \langle\, n \mid \psi\rangle$ koeficijenti razvoja od $|\,\psi\,\rangle$ po diskretnom svojstvenom podbazisu od $\hat{A}$. Ako (2.3.15) napišemo *mutatis mutandis* (tj. menjajući šta treba promeniti) i za drugi vektor $|\,\psi'\,\rangle \in \mathcal{H}$, onda skalarni proizvod možemo izraziti pomoću koeficijenata razvoja:

$$\langle\, \psi' \mid \psi\rangle = \int_p^t \psi'^*(s)\psi(s)\,\mathrm{d}s + \sum_n {\psi'_n}^*\psi_n. \tag{2.3.16}$$

Za specijalni slučaj $|\,\psi'\,\rangle = |\,\psi\,\rangle$, formulom (2.3.16) izražavamo kvadrat norme.

2.3.2 Gustina verovatnoće

Postulat III smo formulisali tako (u § 2.1.5) da se neposredno proširuje na slučaj kada opservabla $\hat{A}$ ima i kontinualni spektar. Naime, *spektralnoj meri* proizvoljnog intervala $[a,b]$, tj. projektoru $\hat{P}_{[a,b]}$, u opštem slučaju doprinosi kako diskretni tako i kontinualni spektar preko svojih preseka sa intervalom $[a,b]$ i odgovarajućih svojstvenih projektora:

$$\boxed{\hat{P}_{[a,b]} \stackrel{\text{def}}{=} \textstyle\sum_{\{n\ \mid\ a_n\in[a,b]\}} \hat{P}_n + \int_{a'}^{b'} |\,s\,\rangle\,\mathrm{d}s\langle s\,|} \tag{2.3.17}$$

ako je, recimo, interval $[a',b']$ presek intervala $[a,b]$ sa kontinualnim spektrom $[p,t]$ od $\hat{A}$: $[a',b'] \stackrel{\text{def}}{=} [a,b]\cap[p,t]$.

Ključna formula za verovatnoću (2.1.7) raščlanjuje se pomoću (2.3.17) na sledeći način:

$$\boxed{v([a,b],\hat{A},\psi) = \textstyle\sum_{\{n\ \mid\ a_n\in[a,b]\}}\langle\psi \mid \hat{P}_n \mid \psi\,\rangle + \int_{a'}^{b'} |\psi(s)|^2\,\mathrm{d}s}. \tag{2.3.18}$$

Funkcija $\rho(s,\hat{A},\psi) = |\psi(s)|^2$ naziva se *gustinom verovatnoće*, jer $|\psi(s)|^2\,\mathrm{d}s$ je verovatnoća da merenje opservable $\hat{A}$ u stanju ψ daje rezultat iz infinitezimalnog intervala $[s-\frac{1}{2}\,\mathrm{d}s, s+\frac{1}{2}\,\mathrm{d}s]$ (pod pretpostavkom da nijedna od diskretnih svojstvenih vrednosti ne pada u taj interval).

Zadatak 2.3.1 Dokazati lemu L 2.2.2 i korolare K 2.2.1 i K 2.2.2 za opšti slučaj opservable.

2.3.3 Rezultati merenja iz kontinualnog spektra

Ako je s tačka iz kontinualnog spektra opservable $\hat{A}$ (a ne pripada diskretnom spektru), onda $\hat{P}_{[s]} = 0$. (Spektralnu meru tačke $\hat{P}_{[s]} = 0$ ne treba mešati sa $|\,s\,\rangle\langle s\,|$, koji je uopšteni projektor pravca u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ i nije projektor u $\mathcal{H}$.) To znači da u svakom stanju ψ:

$$v(s,\hat{A},\psi) = 0. \tag{2.3.19}$$

Na osnovu Postulata IV (u § 2.2.4), (2.3.19) moramo interpretirati tako da *nijedan pojedinačni kvantni sistem nikada ne može* (kao rezultat kvantnog merenja) *imati tačnu vrednost s*.

U stvari to i nije začuđujuće ako imamo u vidu da svako merenje nužno ima rezoluciju $q > 0$. Naime, po pravilu, merenje daje neki rezultat a sa tačnošću[2.3.4] q, tj. rezultat leži u intervalu $[a - \frac{1}{2}q, a + \frac{1}{2}q]$. Za merenje diskretnih svojstvenih vrednosti ovo je ipak dovoljno za tačno merenje, jer rezolucija merenja može biti u principu proizvoljno fina (q proizvoljno malo)[2.3.5]. Ali za kontinualnu svojstvenu vrednost uvek preostaje konačni interval kao rezultat.

2.3.4 Srednja vrednost

Formula za *srednju vrednost*

$$\boxed{\langle\, \hat{A}\, \rangle_\psi = \langle \psi \mid \hat{A} \mid \psi \,\rangle}, \tag{2.3.20}$$

tj. (2.2.10), važi i u opštem slučaju opservable $\hat{A}$. Naime, iz (2.3.18) sledi na osnovu same definicije srednje vrednosti:

$$\langle\, \hat{A}\, \rangle_\psi = \sum_n a_n \langle \psi \mid \hat{P}_n \mid \psi \,\rangle + \int_p^t s|\psi(s)|^2 \, \mathrm{d}s. \tag{2.3.21}$$

Pošto je $|\psi(s)|^2 = \langle\, \psi \mid s \rangle \langle\, s \mid \psi \rangle$, imamo

$$\langle\, \hat{A}\, \rangle_\psi = \langle \psi \mid (\sum_n a_n \hat{P}_n + \int_p^t \mid s\,\rangle s \langle s \mid \, \mathrm{d}s) \mid \psi \,\rangle. \tag{2.3.22}$$

Najzad, (2.3.20) sledi iz činjenice da je izraz u zagradi u (2.3.22) u stvari operator $\hat{A}$ napisan u spektralnoj formi (uporediti (2.3.14)).

2.3.5 * Borel-ovo σ-polje realne ose

Kao što smo rekli u § 2.3.3, intervali se prirodno pojavljuju iz fizičkog razloga konačne rezolucije svih mernih aparata. Međutim, sa matematičke tačke gledišta, mnoštvo svih intervala (sva četiri tipa) nije dovoljno zatvorena struktura. Teorija mere (bez obzira da li se radi o nenegativnoj brojnoj meri ili o projektorskoj meri koja će tek, sa svoje strane, da definiše brojnu meru — verovatnoću u našem slučaju) iziskuje da mnoštvo skupova za koje se definiše mera (tzv. merljivi skupovi) bude bar tzv. Borel-ovo σ-polje ili mnoštvo svih Borel-ovih skupova. To je u stvari minimalno σ-polje nad mnoštvom svih intervala. σ-poljem se naziva takvo mnoštvo skupova koje je zatvoreno na *sve* unije i preseke ne više od prebrojivo beskonačno mnogo skupova iz mnoštva (σ je tu umesto kardinalnog broja prebrojivo beskonačnog skupa koji se obično piše kao $\aleph_0$, tzv. alef nula).

Dakle, mnoštvo svih intervala realne ose "obrazuje" Borel-ovo σ-polje u smislu da se to mnoštvo mora maksimalno proširiti kako bi se zatvorilo u pogledu pomenutih σ-operacija.

[2.3.4] Ne treba misliti da su idealna merenja u kvantnoj mehanici idealna i po rezoluciji, tj. da je $q = 0$. "Idealnost" je samo u tome da se pretpostavlja apsolutno sigurno dobijanje nekog rezultata. Naime, realni eksperiment može i da omane i da ne da nikakvu informaciju.

[2.3.5] Ako je diskretna svojstvena vrednost a_n neke opservable $\hat{A}$ tačka nagomilavanja diskretnog spektra iste opservable, onda se zbog $q > 0$, očigledno, a_n ne može dobiti kao tačan rezultat merenja. Fizički ovo je patološki slučaj, posledica zatvaranja (u smislu upotpunjavanja) matematičkog aparata.

U linearnoj analizi se dokazuje važan stav, koji daje matematičke osnove našem Postulatu o opservablama: Svaki hermitski operator u Hilbert-ovom prostoru povezan je (biunivoko) sa jednom (projektorskom) spektralnom merom definisanom na Borel-ovom σ-polju realne ose. Dotična veza se uspostavlja preko spektralne forme hermitskog operatora.

2.4 Kompatibilne opservable i merenje

U ovom odeljku proučićemo kompatibilne opservable, koje najviše liče na klasične varijable u pogledu svog uzajamnog odnosa. Objasnićemo kako se formiraju kompletni skupovi kompatibilnih opservabli, pomoću kojih ćemo dopuniti Postulat o stanjima i zasnovati teoriju reprezentovanja (izloženu u § 2.7-§ 2.9). Definisaćemo kvantno-mehaničko merenje i izvešćemo formule za promenu stanja pri merenju

2.4.1 Kompatibilne opservable

Sad ćemo videti koji je najpovoljniji uzajamni odnos u kojem dve opservable mogu da budu i šta je fizički smisao tog odnosa.

Ako dva hermitska operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$ u $\mathcal{H}$ komutiraju, tj. ako važi

$$\boxed{[\hat{A},\hat{B}] \overset{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0}, \tag{2.4.1}$$

onda se kaže da se radi o *kompatibilnim opservablama*. Operator $[\hat{A},\hat{B}]$ se naziva *komutatorom* od $\hat{A}$ i $\hat{B}$.

U teoriji Hilbert-ovih prostora dokazuje se sledeći stav.

Stav 2.4.1 *Ako su $\hat{A}_1, \hat{A}_2, ..., \hat{A}_n$ hermitski operatori u $\mathcal{H}$ od kojih svaka dva komutiraju, onda postoji (nejednoznačno određen) hermitski operator $\hat{B}$ u $\mathcal{H}$ takav da je svaki od pomenutih operatora njegova operatorska funkcija*[2.4.1]*:*

$$\hat{A}_1 = f_1(\hat{B}), \hat{A}_2 = f_2(\hat{B}), ..., \hat{A}_n = f_n(\hat{B}), \tag{2.4.2}$$

i obratno, (2.4.2) povlači komutativnost operatora $\hat{A}_1, \hat{A}_2, ..., \hat{A}_n$.

Prema Postulatu II $\hat{B}$ je opservabla, a njeno merenje predstavlja istovremeno merenje svih n opservabli $\hat{A}_1, .., \hat{A}_n$. Naime, ako merenje opservable $\hat{B}$ daje rezultat b na nekom kvantnom sistemu, onda na istom sistemu imamo rezultat $f_1(b)$ za $\hat{A}_1$, $f_2(b)$ za $\hat{A}_2$,...,$f_n(b)$ za $\hat{A}_n$. Stoga se *fizički smisao* kompatibilnosti opservabli sastoji u mogućnosti njihovog *istovremenog merenja.*

Nekompatibilne opservable (tj. nekomutirajući hermitski operatori) se ne mogu istovremeno meriti. Na njih se odnosi Heisenberg-ov princip neodređenosti (§ 1.2 i § 4.1).

[2.4.1] Podsetimo se da je po definiciji hermitski operator $\hat{A}$ funkcija hermitskog operatora $\hat{B}$ ako je *svaki* svojstveni vektor (pravi ili uopšteni) od $\hat{B}$ svojstveni vektor i od $\hat{A}$. Piše se i $\hat{A} = f(\hat{B})$ ako iz $\hat{B} \mid b\,\rangle = b \mid b\,\rangle$ sledi $\hat{A} \mid b\,\rangle = f(b) \mid b\,\rangle$, pri čemu je f jedna brojna funkcija (analitička ili opštija).

2.4.2 Kompletan skup kompatibilnih opservabli

Sada ćemo se upoznati sa jednim od najosnovnijih i najvažnijih pojmova kvantne mehanike, čiji je naziv dat u naslovu paragrafa.

Počećemo definicijom *kompletne opservable* $\hat{A}$. To je hermitski operator sa prostim spektrom, tj. opservabla čija je svaka svojstvena vrednost (diskretna i kontinualna) *nedegenerisana* i stoga jednoznačno, s tačnošću do faznog faktora, definiše odgovarajući (pravi odnosno uopšteni) svojstveni vektor. Spektralna forma kompletne opservable $\hat{A}$ glasi:

$$\hat{A} = \sum_n a_n \mid n\rangle\langle n \mid + \int_p^t \mid s\rangle s\langle s \mid \, \mathrm{d}s, \tag{2.4.3}$$

gde su $\mid n\rangle$ i $\mid s\rangle$ pomenuta jednoznačna rešenja diskretnog odnosno kontinualnog svojstvenog problema: $\hat{A} \mid n\rangle = a_n \mid n\rangle$, $\hat{A} \mid s\rangle = s \mid s\rangle$.

Kompletna opservabla se, na žalost, susreće dosta retko među značajnim fizičkim veličinama. Srećom nju može u potpunosti da zameni njeno uopštenje, tzv. *kompletan* ili *potpun skup kompatibilnih opservabli*. To je izvestan broj[2.4.2], recimo K, kompatibilnih opservabli $\hat{A}_1, \hat{A}_2, ..., \hat{A}_K$ čiji su *svi zajednički svojstveni potprostori* (u $\mathcal{H}$ i u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$) *jednodimenzionalni*.

Zajednički svojstveni potprostor je u ovom slučaju skup svih zajedničkih ili *istovremenih* rešenja $\mid a_1, a_2, ..., a_K\rangle$ svojstvenih problema

$$\hat{A}_k \mid a_1, a_2, ..., a_K\rangle = a_k \mid a_1, ..., a_K\rangle, \quad k = 1, 2, \ldots, K \tag{2.4.4}$$

sa fiksiranim svojstvenim vrednostima a_k od $\hat{A}_k$, $k = 1, 2, \ldots, K$.

Ne mora svaki izbor respektivnih svojstvenih vrednosti $a_1, a_2, ..., a_K$ da da neko nenulto rešenje sistema jednakosti (2.4.4). To se kaže da možemo imati nekompatibilne svojstvene vrednosti kompatibilnih opservabli. Slog brojeva $a_1, a_2, ..., a_K$ koji daje nenulto rešenje u (2.4.4), znači koji definiše zajednički svojstveni potprostor (tzv. kompatibilne svojstvene vrednosti) je analogon jedne svojstvene vrednosti a_n ili s kompletne opservable $\hat{A}$ i, po definiciji kompletnog skupa $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \ldots, \hat{A}_K$, mora biti *nedegenerisan*, tj. mora da jednoznačno (do na fazni faktor) određuje $\mid a_1, a_2, ..., a_K\rangle \neq 0$.

Napomenimo uzgred da se indeks n, koji prebrojava diskretne svojstvene vrednosti a_n neke opservable $\hat{A}$, obično naziva *kvantnim brojem*. On ne uzima nužno cele vrednosti niti nužno sve uzastopne vrednosti, ali je po pravilu njegov skup vrednosti prostiji od samog diskretnog spektra opservable. Analogno kao što smo rekli za svojstvene vrednosti, i kvantni brojevi kompatibilnih opservabli $\hat{A}_1, \hat{A}_2, ..., \hat{A}_K$ daju, u opštem slučaju, kompatibilne i nekompatibilne kombinacije konkretnih vrednosti $n_1, n_2, ..., n_K$, prema tome da li postoji zajednički svojstveni vektor $0 \neq\mid n_1, n_2, ..., n_K\rangle \stackrel{\text{def}}{=}\mid a_{n_1}, a_{n_2}, ..., a_{n_K}\rangle$ ili ne.

Ako neka opservabla $\hat{A}_1$ nije kompletna (što će često biti slučaj na primer sa hamiltonijanom kvantnog sistema), možemo je *kompletirati*, tj. dopuniti do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli. Ovo dopunjavanje je, naravno, nejednoznačno.

Da bismo u sledećem paragrafu bolje razumeli geometrijski sadržaj pomenutog dopunjavanja (a i za druge kasnije potrebe), podsetimo se još nekoliko stavova o komutiranju operatora iz teorije Hilbert-ovih prostora, koji imaju veoma važnu primenu u kvantnoj mehanici.

[2.4.2] Mada matematički u datom Hilbert-ovom prostoru K može biti proizvoljno, videćemo kasnije da za fizički najvažnije potpune skupove kompatibilnih opservabli u prostoru stanja $\mathcal{H}$ kvantnog sistema K je fiksiran broj i ima fizički smisao broja stepeni slobode sistema.

Stav 2.4.2 *Hermitski operator $\hat{A}$ i hermitski, unitarni ili antiunitarni operator $\hat{B}$ u $\mathcal{H}$ komutiraju ako i samo ako $\hat{B}$ komutira sa* svakim svojstvenim projektorom *od $\hat{A}$.*

Stav 2.4.3 *Hermitski operator $\hat{A}$ i hermitski, unitarni ili antiunitarni operator $\hat{B}$ u $\mathcal{H}$ komutiraju ako i samo ako je* svaki svojstveni potprostor *od $\hat{A}$* invarijantan *za $\hat{B}$.*

U invarijantnom potprostoru operator $\hat{B}$ samim svojim delovanjem indukuje jedan operator. Kaže se da se $\hat{B}$ *redukuje* u taj operator u dotičnom potprostoru.

Stav 2.4.4 *Dva hermitska operatora $\hat{A}_1$ i $\hat{A}_2$ u $\mathcal{H}$ komutiraju ako i samo ako* svaki *svojstveni projektor prvog komutira sa svakim svojstvenim projektorom drugog.*

Stav 2.4.5 *Ako dva projektora $\hat{P}_1$ i $\hat{P}_2$ komutiraju, onda je $\hat{P}_1\hat{P}_2$ projektor i on projektuje $\mathcal{H}$ na potprostor $\mathcal{R}(\hat{P}_1) \cap \mathcal{R}(\hat{P}_2)$.*

Stav 2.4.6 *Dva hermitska operatora $\hat{A}_1$ i $\hat{A}_2$ komutiraju ako i samo ako postoji (bar jedan)* zajednički svojstveni bazis[2.4.3] *u $\mathcal{H}$ ili u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$.*

Ovaj bazis se u opštem slučaju sastoji delom od pravih, a delom od uopštenih vektora. Svi gornji stavovi se odnose na potprostore i projektore u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ isto kao u $\mathcal{H}$.

2.4.3 Dopunjavanje nekompletne opservable

Ako je $\hat{A}_1$ nekompletna opservabla, *ne* možemo je dopuniti (kompatibilnom) opservablom $\hat{A}_2$ koja je *funkcija* od $\hat{A}_1$, tj. sa $\hat{A}_2 = f(\hat{A}_1)$. Naime, kao što sledi iz Stava S 2.4.3, $\hat{A}_2$ se redukuje u svakom svojstvenom potprostoru $\mathcal{V}(a_1)$ od $\hat{A}_1$ (a_1 je odgovarajuća svojstvena vrednost). Zbog funkcionalne zavisnosti, $\hat{A}_2$ se redukuje u broj $f(a_1)$ (uporediti Primedbu 2.4.1), tj. svaki $\mathcal{V}(a_1)$ je već sam zajednički svojstveni potprostor od $\hat{A}_1$ i $\hat{A}_2$ i nismo se odmakli od početnih svojstvenih potprostora (od kojih je bar jedan bio bar dvodimenzionalan).

Ako kompatibilna opservabla $\hat{A}_2$ nije funkcija od $\hat{A}_1$, ona se u potprostorima $\mathcal{V}(a_1)$ redukuje u netrivijalne operatore. Ovi onda svojom svojstvenom dekompozicijom dalje razlažu $\mathcal{V}(a_1)$ i tako daju zajedničke svojstvene potprostore od $\hat{A}_1$ i $\hat{A}_2$, manje dimenzije.

Ako je skup $\hat{A}_1$, $\hat{A}_2$ i dalje nekompletan, moramo ga dalje dopunjavati trećom kompatibilnom opservablom $\hat{A}_3$ itd.

Zadatak 2.4.1 Neka je $\mathcal{H}$ trodimenzionalan i neka je u njemu zadat bazis $\{|\,1\,\rangle, |\,2\,\rangle, |\,3\,\rangle\}$. Definišimo dve opservable preko spektralne forme:

$$\hat{A} \stackrel{\text{def}}{=} a_1\hat{P}_1 + a_2\hat{P}_2, \quad a_1 \neq a_2, \tag{2.4.5a}$$

$$\hat{P}_1 \stackrel{\text{def}}{=} |\,1\,\rangle\langle 1\,|, \quad \hat{P}_2 \stackrel{\text{def}}{=} |\,2\,\rangle\langle 2\,| + |\,3\,\rangle\langle 3\,|\,. \tag{2.4.5b}$$

$$\hat{B} \stackrel{\text{def}}{=} b_1\hat{Q}_1 + b_2\hat{Q}_2, \quad b_1 \neq b_2, \tag{2.4.6a}$$

$$\hat{Q}_1 \stackrel{\text{def}}{=} |\,1\,\rangle\langle 1\,| + |\,2\,\rangle\langle 2\,|, \quad \hat{Q}_2 \stackrel{\text{def}}{=} |\,3\,\rangle\langle 3\,|\,. \tag{2.4.6b}$$

[2.4.3] Odsad ćemo stalno pod "bazisom" podrazumevati ortonormirani kompletni bazis (ako nam zatreba opštiji, to ćemo posebno istaći). Pod bazisom u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ se podrazumeva skup uopštenih vektora po kojima se svaki pravi vektor može jednoznačno razviti.

A. Pokazati a) da su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ nekompletne opservable; b) da su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ kompatibilne opservable; c) da je $\hat{A}, \hat{B}$, kompletan skup kompatibilnih opservabli.

B. a) Koje su svojstvene vrednosti od $\hat{A}$ kompatibilne sa kojim svojstvenim vrednostima od $\hat{B}$? b) U koje operatore se $\hat{B}$ redukuje u pojedinim svojstvenim potprostorima od $\hat{A}$? c) Pokazati kako ovi operatori, u koje se $\hat{B}$ redukovao, svojom svojstvenom dekompozicijom dalje razlažu svojstvene potprostore od $\hat{A}$ i tako daju upravo zajedničke svojstvene potprostore operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$.

C. Ilustrovati Stavove S 2.4.1-S 2.4.6 na primeru operatora iz zadatka Z 2.4.1.

Zadatak 2.4.2 A. Dokazati da je opservabla $\hat{B}$ koju u smislu Stava S 2.4.1 definiše neki kompletan skup kompatibilnih opservabli $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \ldots, \hat{A}_K$ nužno kompletna opservabla.

B. Ilustrovati rezultat iz A. na primeru opservabli $\hat{A}$ i $\hat{B}$ iz zadatka Z 2.4.1.

Kompletna opservabla je specijalni slučaj kompletnog skupa kompatibilnih opservabli kada je $K = 1$. S druge strane, vidimo iz Zadatka Z 2.4.2.A. i iz Stava S 2.4.1, da bilo koji potpuni skup opservabli možemo, bar u principu, zameniti jednom jedinom kompletnom opservablom.

Po pravilu se *a priori* ne zna koji je kompatibilni skup kompletan, bar ne dok prostor stanja $\mathcal{H}$ nije dobro poznat. A to se obično saznaje ili iz analogije sa klasičnom fizikom ili iz eksperimenta.

2.4.4 Merenje

Sada ćemo da definišemo pojam merenja. Čitaocu je već, bez sumnje, jasno da je to jedan od kamena temeljaca kvantne mehanike.

Pretpostavimo da smo u laboratoriji pripremili ansambl od N kvantnih sistema i da znamo da je ansambl čist i da se opisuje vektorom stanja ψ. Pretpostavimo, osim toga, da imamo aparat koji nakon interakcije sa pojedinim kvantnim objektima iz našeg ansambla pokazuje neki rezultat a, koji je diskretna svojstvena vrednost neke opservable $\hat{A}$. Neka N_a sistema iz ansambla daju određeni rezultat a.

Definicija 2.4.1 *Pomenuti aparat se naziva kvantnim mernim aparatom, a njegova interakcija sa sistemima pomenutog ansambla* prediktivnim merenjem[2.4.4] *(ili merenjem prve vrste) opservable $\hat{A}$ ako su zadovoljena sledeća dva uslova za svako početno stanje ψ i za svaku diskretnu svojstvenu vrednost a od $\hat{A}$:*

i) $\frac{N_a}{N} \to \langle \psi \mid \hat{P}_a \mid \psi \rangle = v(a, \hat{A}, \psi)$, *kada* $N \to \infty$
($\hat{P}_a$ je svojstveni projektor od $\hat{A}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti a);

ii) po prestanku interakcije aparata i sistema svaki od pomenutih N_a sistema ima vrednost a od $\hat{A}$ (tj. dao bi ovaj rezultat apsolutno sigurno u ponovljenom merenju);

Ako je dodatno ispunjen sledeći uslov, merenje se naziva *idealnim*:

iii) svaka opservabla $\hat{B}$ kompatibilna sa $\hat{A}$ koja je imala oštru vrednost b u početnom stanju ψ, u svakom od pomenutih N_a sistema i nakon merenja ima vrednost b.

[2.4.4] U literaturi je uobičajeno da se formuliše i postulat "redukcije talasnog paketa", koji u suštini sadrži iskaze naših Teorema T 2.4.1 i T 2.4.4 niže. Naš prilaz preko definicije merenja kao određene interakcije, sa izvođenjem pomenutih rezultata kao posledica, bazira na radovima: F. Herbut, *Annals of Physics*, **55** (1969) 271 i F. Herbut, *International Journal of Theoretical Physics*, **11** (1974) 193.

Primer selektivnog prediktivnog merenja imali smo u eksperimentu sa polupropusnim ogledalom u varijanti b' (videti § 1.2.1), kada smo ogledalo u D (videti C 1.3A) zamenili detektorom i tako smo izdvojili podansambl fotona koji se kreću optičkim putem 1, preko ogledala u B.

Idealno merenje se u kvantnoj mehanici obično naziva prosto merenjem.

2.4.5 Promena stanja pri merenju — nedegenerisana svojstvena vrednost

U ovom paragrafu daćemo odgovor na pitanje kako merenje menja stanje ψ.

Pretpostavimo da je diskretna svojstvena vrednost a opservable $\hat{A}$ *nedegenerisana*, tj. da joj odgovara jednodimenzionalni svojstveni potprostor ili, kao što se obično kaže, svojstveni pravac. Selektivno merenje vrednosti a od $\hat{A}$ se onda naziva *kompletnim*.

Teorem 2.4.1 *Merenje nedegenerisane diskretne svojstvene vrednosti a opservable $\hat{A}$ prevodi proizvoljno početno stanje $\mid \psi \rangle$ u svojstveno stanje $\mid a \rangle$ od $\hat{A}$, tj. u stanje koje je definisano sa*

$$\hat{A} \mid a \rangle = a \mid a \rangle, \quad \langle a \mid a \rangle = 1. \tag{2.4.7}$$

Dokaz: Uslov ii) definicije prediktivnog merenja garantuje da konačni kvantni ansambl ima oštru vrednost a od $\hat{A}$, a kao što smo videli u § 2.2.6 (a.1 $\Leftrightarrow$ c.1), to u slučaju čistog stanja može biti samo ako se radi o svojstvenom vektoru definisanom sa (2.4.7).

A priori konačno stanje ne mora biti čisto stanje. Međutim, pošto je a nedegenerisana svojstvena vrednost od $\hat{A}$, postoji samo jedno čisto stanje koje zadovoljava (2.4.7) (s tačnošću do proizvoljnog faznog faktora). Ako pretpostavimo da je konačno stanje mešano (uporediti § 1.4.12), tj. pomešano iz više čistih podansambala, očigledno svi oni takođe moraju imati oštru vrednost a od $\hat{A}$ (jer pojedinačni sistemi imaju ovu vrednost), te moraju biti određeni sa (2.4.7). A pošto (2.4.7) jednoznačno određuje čisto stanje, konačno mešano stanje ne može sadržavati dva neekvivalentna čista stanja, tj. ono mora biti čisto. *Q. E. D.*

Pošto se češće koristimo potpunim skupom kompatibilnih opservabli nego jednom kompletnom opservablom, formulišimo odgovarajuće uopštenje Teorema T 2.4.1.

Teorem 2.4.2 *Ako se izvrši istovremeno merenje diskretnih svojstvenih vrednosti a_k od $\hat{A}_k$, $k = 1, 2, ..., K$, pri čemu $\hat{A}_1, \hat{A}_2, ..., \hat{A}_K$ čine kompletan skup kompatibilnih opservabli, onda proizvoljno stanje $\mid \psi \rangle$ prelazi u stanje $\mid a_1, a_2, ..., a_K \rangle$ definisano (do faznog faktora) sa $\hat{A}_k \mid a_1, a_2, ..., a_K \rangle = a_k \mid a_1, a_2, ..., a_K \rangle$, $k = 1, 2, ..., K$, $\langle a_1, a_2, ..., a_K \mid a_1, a_2, ..., a_K \rangle = 1$.*

Dokaz: odmah sledi iz prethodnog Teorema ako skup $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \ldots, \hat{A}_K$ zamenimo kompletnom opservablom $\hat{B}$ u smislu Stava S 2.4.1 (uporediti Zadatak Z 2.4.2.A). *Q. E. D.*

2.4.6 Kako se vektor stanja pridružuje ansamblu

U ovom kratkom paragrafu ukazaćemo na jednu važnu posledicu Teorema T 2.4.2.

Kada smo formulisali Postulat o stanjima, nismo još imali razrađen kvantnomehanički formalizam i nismo mogli ništa da kažemo o samom načinu pridruživanja vektora stanja $\mid \psi \rangle$ datom homogenom kvantnom ansamblu. Sada ćemo popuniti ovu prazninu.

Vidi se da je rezultat selektivnog merenja iz Teorema T 2.4.2 stanje $\mid a_1, a_2, ..., a_K \rangle$ i to bez obzira od kog stanja se polazi (ako je $v(a_1, a_2, \ldots, a_K; \hat{A}_1, \hat{A}_2, \ldots, \hat{A}_K; \psi) \stackrel{\mathrm{def}}{=} |\langle\, a_1, a_2, ..., a_K \mid \psi\rangle|^2 \neq 0$). Baš zbog toga se ovo merenje može iskoristiti za preparaciju ansambla u stanju $\mid a_1, a_2, ..., a_K \rangle$:

Korolar 2.4.1 *Kvantni ansambl sistema na kojima su dobijeni (kompatibilni) rezultati* a_k *od* $\hat{A}_k$*,* $k = 1, 2, ..., K$*, pri selektivnom prediktivnom merenju potpunog skupa kompatibilnih opservabli* $\hat{A}_1, \hat{A}_2, ..., \hat{A}_K$ *homogen je i opisan vektorom stanja* $\mid a_1, a_2, ..., a_K \rangle$ *(bez obzira na to kakav je bio polazni ansambl).*

2.4.7 Verovatnoća prelaza

Kao što smo videli u Teoremima T 2.4.1 i T 2.4.2 vektori stanja se pojavljuju u formalizmu ne samo pre merenja, nego i posle, kao stanja u koja sistemi mogu da pređu pri kompletnom selektivnom merenju.

Teorem 2.4.3 Verovatnoća prelaza *kvantnog sistema iz stanja* ψ *u stanje* φ *glasi*

$$v(\psi \rightarrow \varphi) = |\langle\, \varphi \mid \psi\rangle|^2. \tag{2.4.8}$$

Dokaz: Neka je φ definisan kao normirani svojstveni vektor neke opservable $\hat{A}$ koji odgovara nedegenerisanoj diskretnoj svojstvenoj vrednosti a. Verovatnoća prelaza u stanje φ je onda isto što i verovatnoća rezultata a pri merenju opservable $\hat{A}$ (videti Teorem T 2.4.1). Prema tome, $v(\psi \rightarrow \varphi) = v(a, \hat{A}, \psi) = |\langle\, \varphi \mid \psi\rangle|^2$ (iskoristili smo (2.2.9)). *Q. E. D.*

Zadatak 2.4.3 Pokazati da je verovatnoća prelaza $v(\psi \rightarrow \varphi)$ jednaka jedinici ako i samo ako ψ i φ opisuju isto stanje. (Indikacija: Razviti ψ po bazisu u kome je φ jedan od bazisnih vektora.)

2.4.8 Promena stanja pri merenju — degenerisana svojstvena vrednost

Postavlja se pitanje kako da se uopšti Teorem T 2.4.1 na slučaj kad se radi o merenju *degenerisane* diskretne svojstvene vrednosti a neke opservable $\hat{A}$ (odgovarajući svojstveni projektor $\hat{P}_a$ onda, po definiciji, projektuje na višedimenzionalni potprostor, tj. $\mathrm{Tr}\,\hat{P}_a > 1$).

Videli smo u prethodnom odeljku da je nemoguće u merenju dobiti kontinualnu svojstvenu vrednost. Pri proučavanju efekta merenja na stanje ograničićemo se (radi jednostavnosti) na opservable sa čisto diskretnim spektrom, tj. na opservable koje imaju svojstveni bazis. Neka je spektralna forma ovakve opservable

$$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n, \tag{2.4.9}$$

$$n \neq n' \Rightarrow a_n \neq a_{n'}; \quad \hat{P}_n \hat{P}_{n'} = \delta_{nn'} \hat{P}_n; \quad \sum_n \hat{P}_n = \hat{I}, \tag{2.4.10a,b,c}$$

gde su a_n (različite) svojstvene vrednosti, a $\hat{P}_n$ odgovarajući svojstveni projektori od $\hat{A}$, a $\hat{I}$ je identični operator u $\mathcal{H}$.

Teorem 2.4.4 *Ako $v(a_n, \hat{A}, \psi) > 0$, gde je $\hat{A}$ opservabla sa čisto diskretnim spektrom, onda merenje svojstvene vrednosti a_n od $\hat{A}$ prevodi početno stanje ψ u stanje*

$$\boxed{|\,\chi_n\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{\langle\,\psi\,|\hat{P}_n|\,\psi\,\rangle}}\hat{P}_n\,|\,\psi\,\rangle}. \tag{2.4.11}$$

Dokaz ćemo dati u Dodatku § 2.4.11.

Zadatak 2.4.4 Pokazati da je Teorem T 2.4.4 uopštenje Teorema T 2.4.1, tj. da je $|\,a\rangle$ iz (2.4.7) specijalni slučaj od $|\,\chi_n\,\rangle$ u (2.4.11).

Teorem T 2.4.4 se lako može uopštiti na slučaj opservable koja ima i kontinualni spektar, ali merena svojstvena vrednost a_n mora da pripada diskretnom spektru.

2.4.9 Uslovna verovatnoća

Sad možemo postaviti pitanje kako da se uslovna verovatnoća (1.4.3) i dve u fizici važne formule (1.4.4) i (1.4.5) prenesu u kvantnu mehaniku.

U kvantnom prostoru stanja (uporediti Postulat I u § 2.2.2) operacija "istovremeno sa", koja je u klasičnom prostoru događaja primenljiva na bilo koja dva događaja (operacija "$\cap$"), može da se primeni *samo* na dva *kompatibilna događaja*, tj. na dva komutirajuća projektora, na primer na $\hat{P}_1$ i $\hat{P}_2$, $[\hat{P}_1, \hat{P}_2] = 0$, a njihov *proizvod* $\hat{P}_1\hat{P}_2$ (koji je nužno opet projektor) je onda kvantni događaj "$\hat{P}_1$ istovremeno sa $\hat{P}_2$".

Ako je $|\,\psi\rangle$ proizvoljno stanje, $v(1, \hat{P}_1, \psi) > 0$ i $|\,\chi\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{||\hat{P}_1\,|\,\psi\,\rangle||}\hat{P}_1\,|\,\psi\,\rangle$ stanje u koje prelazi $|\,\psi\,\rangle$ pri selektivnom merenju svojstvene vrednosti 1 opservable $\hat{P}_1$ (tj. kada se "desi" događaj $\hat{P}_1$), onda je

$$v(1, \hat{P}_1\hat{P}_2, \psi) = v(1, \hat{P}_1, \psi)v(1, \hat{P}_2, \chi), \tag{2.4.12}$$

gde je poslednja verovatnoća *uslovna verovatnoća*; uslov je da se desio događaj $\hat{P}_1$ i on ulazi u verovatnoću preko χ, a (2.4.12) je analogon od (1.4.4).

Ako je $\hat{P}_2 \leq \hat{P}_1$ (na jeziku oblasti likova $\mathcal{R}(\hat{P}_2) \subseteq \mathcal{R}(\hat{P}_1)$), tj. ako dešavanje događaja $\hat{P}_2$ "povlači" dešavanje događaja $\hat{P}_1$, kao što se u kvantnoj logici kaže, onda

$$v(1, \hat{P}_2, \psi) = v(1, \hat{P}_1, \psi)v(1, \hat{P}_2, \chi). \tag{2.4.13}$$

Zadatak 2.4.5 Dokazati (2.4.12) i (2.4.13). (Indikacija: Imati u vidu da je $\hat{P}_2 \leq \hat{P}_1 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{P}_2\hat{P}_1 = \hat{P}_2$.)

2.4.10 Prediktivno i retrospektivno merenje i preparacija

Neka su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ dve opservable sa čisto diskretnim spektrom takve da po jednoj svojstvenoj vrednosti a_n od $\hat{A}$ i b_n od $\hat{B}$ odgovara isti svojstveni projektor $\hat{P}_n$. Iz formule za verovatnoću i formule za promenu stanja pri merenju odmah se vidi da $v(a_n, \hat{A}, \psi) = v(b_n, \hat{B}, \psi)$, $\forall\psi$, kao i da ψ prelazi u isto stanje bez obzira da li se meri $\hat{A}$ i dobije a_n ili se meri $\hat{B}$ i dobije b_n kao rezultat. Opservabla bi mogla da ima, pored diskretnog i kontinualni spektar, i to ne bi imalo uticaj na selektivno merenje diskretne svojstvene vrednosti.

Sada ćemo prodiskutovati jednu neposrednu posledicu Teorema T 2.4.4.

Korolar 2.4.2 *Ako u stanju ψ opservabla $\hat{A}$ ima oštru vrednost a, onda selektivno merenje koje daje a od $\hat{A}$* uopšte ne menja *ψ (bez obzira da li je multiplicitet svojstvene vrednosti a jedan ili više).*

Dokaz: Oštra vrednost znači $\hat{A} \mid \psi \rangle = a \mid \psi \rangle$, što je ekvivalentno sa $\hat{P}_a \mid \psi \rangle = \mid \psi \rangle$, gde je $\hat{P}_a$ svojstveni projektor od $\hat{A}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti a. Iz $\langle \psi \mid \psi \rangle = 1$ onda sledi $\frac{1}{\sqrt{\langle \psi \mid \hat{P}_a \mid \psi \rangle}} \hat{P}_a \mid \psi \rangle = \mid \psi \rangle$. *Q. E. D.*

Zbog iskaza Korolara K 2.4.2, prediktivno merenje nije uvek moguće ostvariti u direktnoj interakciji mernog aparata i merenog kvantnog sistema osim u slučaju tzv. *negativnog merenja*, kada se meri lokalizacija i konstatuje da mereni sistem nije prisutan (kao u pomenutom slučaju varijante b' u eksperimentu sa semireflektivnim ogledalom). Kad je kvantni sistem prisutan i stvarno stupa u interakciju sa mernim aparatom, stanje sistema uvek trpi neku promenu i, ako važi pretpostavka Korolara K 2.4.2, nužno protivureči Korolaru K 2.4.2 i prema tome to nije prediktivno merenje. Neselektivno prediktivno merenje (§ 1.4.14), koje takoreći sadrži u sebi selektivna merenja svih diskretnih svojstvenih vrednosti, može se ostvariti samo u slučaju tzv. distantnog merenja, o čemu će biti reči u § 4.4.6-§ 4.4.7.

Na kraju kvantnog eksperimenta se obično vrši tzv. *retrospektivno merenje* ili merenje druge vrste, koje zadovoljava samo uslov i) iz definicije prediktivnog merenja, a druga dva ne.

Primer ove vrste merenja imali smo u eksperimentu sa dva otvora kao i u eksperimentu sa polupropusnim ogledalom (uporediti i § 1.4.15). U drugom, na primer, merni aparat je bio sastavljen od fotoploča koje su merile lokalizaciju fotona na drugom zastoru. Tu se nije moglo govoriti o stanju u koje se foton prevodi (on se u stvari apsorbuje), ali pojedine vrednosti opservable položaja na zastoru dobijaju se sa različitim relativnim frekvencijama (u stvari pojavljuju se mrlje različitog zacrnjenja), u skladu sa kvantnomehaničkim predviđanjem po Postulatu o verovatnoći.

Na kraju da podsetimo na to da se na početku kvantnog eksperimenta obično vrši *preparacija* kvantnog ansambla. To je laboratorijski postupak za koji važi uslov ii) iz Definicije prediktivnog merenja, a ne nužno i uslovi i) i iii). Osim toga, uređaj koji vrši preparaciju naziva se filtar (on filtrira, tj. propušta samo sisteme koji imaju vrednost a od $\hat{A}$). Kao što smo videli u Korolaru K 2.4.1, kompletno selektivno prediktivno merenje predstavlja ujedno i preparaciju.

2.4.11 * Dodatak — dokaz teorema 4

Indeks n u (2.4.11) zamenićemo sa n_0, a n će biti tekući indeks. Na osnovu (2.4.10c) imamo

$$\mid \psi \rangle = \sum_m \hat{P}_m \mid \psi \rangle = \sum_m{}' \hat{P}_m \mid \psi \rangle, \tag{2.4.14}$$

gde se sumiranje u poslednjem izrazu vrši samo po nenultim sabircima (što je naglašeno oznakom $\sum'$); po pretpostavci iz Teorema T 2.4.4 tu spada i n_0. Zbog idempotentnosti projektora, $\sqrt{\langle \psi \mid \hat{P}_m \mid \psi \rangle} = \sqrt{(\langle \psi \mid \hat{P}_m)(\hat{P}_m \mid \psi \rangle)}$ je norma vektora $\hat{P}_m \mid \psi \rangle$. Prema tome, možemo definisati jedan pomoćni projektor $\hat{Q}$ kao zbir ortogonalnih projektora pravaca:

$$\hat{Q} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_m{}' \frac{1}{\langle \psi \mid \hat{P}_m \mid \psi \rangle} \hat{P}_m \mid \psi \rangle \langle \psi \mid \hat{P}_m. \tag{2.4.15}$$

$\hat{Q}$ je opservabla kompatibilna sa $\hat{A}$. Naime, za bilo koje n, $\hat{P}_n\hat{Q} = 0$ ili $\langle\psi \mid \hat{P}_n \mid \psi\rangle^{-1}\hat{P}_n \mid \psi\rangle\langle\psi \mid \hat{P}_n$, već prema tome da li n ne spada među m-ove ili spada; isto daje i $\hat{Q}\hat{P}_n$. Dakle, $[\,\hat{P}_n, \hat{Q}\,] = 0$, $\forall n$, a prema gornjem Stavu S 2.4.2 onda sledi

$$[\,\hat{Q}, \hat{A}\,] = 0. \tag{2.4.16}$$

Osim toga, $\hat{Q}$ kao opservabla ima oštru vrednost 1 u stanju ψ. Naime, iz (2.4.15) sledi $v(1, \hat{Q}, \psi) = \langle\psi \mid \hat{Q} \mid \psi\rangle = \sum_m \langle\psi \mid \hat{P}_m \mid \psi\rangle = 1$ (na osnovu (2.4.14) i normiranosti ψ).

Prema uslovu iii) iz Definicije merenja, nakon izmerene vrednosti a_{n_0} od $\hat{A}$ kvantni sistem mora i dalje biti u stanju u kojem $\hat{Q}$ ima oštru vrednost 1, a prema uslovu ii), opservabla $\hat{A}$ mora imati oštru vrednost a_{n_0} u tom stanju. Iz $\hat{A}\varphi = a_{n_0}\varphi \;\Leftrightarrow\; \hat{P}_{n_0}\varphi = \varphi$ (2.2.3) sledi da se poslednji iskaz može zameniti iskazom da $\hat{P}_{n_0}$ ima oštru vrednost 1. Pošto $[\,\hat{Q}, \hat{P}_{n_0}\,] = 0$, $\hat{P}_{n_0}\hat{Q}$ je projektor (uporediti gornji Stav S 2.4.5) i ako sa χ obeležimo neko čisto stanje koje ulazi u sastav mešanog stanja koje nastaje pri selektivnom merenju a_{n_0} od $\hat{A}$, onda

$$\hat{P}_{n_0}\hat{Q}\chi = \chi, \tag{2.4.17}$$

pošto i $\hat{P}_{n_0}\hat{Q}$ ima oštru vrednost 1 nakon merenja. Iz (2.4.15) i pretpostavke $v(a_{n_0}, \hat{A}, \psi) > 0$ sledi $\hat{P}_{n_0}\hat{Q} = \langle\psi \mid \hat{P}_{n_0} \mid \psi\rangle^{-1}\hat{P}_{n_0} \mid \psi\rangle\langle\psi \mid \hat{P}_{n_0}$, a to je projektor pravca. (2.4.17) kazuje da χ pripada tom pravcu, tj. $\mid \chi\rangle = \langle\psi \mid \hat{P}_{n_0} \mid \psi\rangle^{\frac{1}{2}} P_{n_0} \mid \psi\rangle$ (izvršili smo izbor najprostijeg faznog faktora). Pošto ovo čisto stanje sledi jednoznačno (kao u dokazu Teorema T 2.4.1), konačno stanje ne može da sadrži dva neekvivalentna čista stanja, tj. mora biti čisto i jednako χ.

2.5 Kvantizacija

Prva četiri postulata kvantne mehanike, koje smo izučavali u prethodnoj grupi odeljaka, vrlo su opšte i apstraktne prirode. Mi još ne znamo kako da dođemo do prostora stanja $\mathcal{H}$ kvantnog sistema i kako da u njemu definišemo bar nekoliko najvažnijih opservabli, na kojima bismo mogli da zasnujemo opisivanje kvantnog ponašanja sistema. U grupi odeljaka § 2.5 i § 2.6 rešićemo ovaj problem, na taj način što ćemo sa pogodnih klasičnih varijabli preći na jedan osnovni skup opservabli tzv. *kvantizacijom*. Na osnovu ovih operatora ćemo onda odrediti prostor stanja. U odeljku § 2.5 izvršićemo ovo određivanje za jednodimenzionalnu česticu — što je relativno prost (mada fiktivan) fizički sistem. U sledećem odeljku ćemo rešiti analogni problem za realnu česticu. Započinjemo odeljak formulacijom Postulata V o kvantizaciji klasičnih varijabi.

2.5.1 Poisson-ove zagrade

Pretpostavimo da imamo jedan kvantni sistem od N čestica. Da je reč o klasičnom sistemu od N materijalnih tačaka, mogli bismo taj fizički sistem da opišemo klasičnom mehanikom. Postavlja se pitanje da li možemo na osnovu klasičnog opisivanja preći na kvantno-mehaničko opisivanje pomenutog kvantnog sistema.

Potvrdan odgovor ćemo formulisati u novom postulatu, u kojem najvažniju ulogu igraju tzv. Poisson-ove (čitati: Puasonove) zagrade (odsad: PZ-e) klasične mehanike. Podsetimo se najpre

da je Poisson-ova zagrada klasičnih varijabli A i B, tj. analitičkih funkcija u faznom prostoru sistema, klasična varijabla:

$$C(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, ..., \mathbf{p}_N) \stackrel{\text{def}}{=} [\, A(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{p}_N), B(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{p}_N)\,]_{\text{PZ}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=1}^{N} (\frac{\partial A}{\partial \mathbf{r}_n} \cdot \frac{\partial B}{\partial \mathbf{p}_n} - \frac{\partial A}{\partial \mathbf{p}_n} \cdot \frac{\partial B}{\partial \mathbf{r}_n}). \quad (2.5.1)$$

gde je

$$\frac{\partial A}{\partial \mathbf{r}_n} \cdot \frac{\partial B}{\partial \mathbf{p}_n} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{q=x,y,z} \frac{\partial A}{\partial q_n} \frac{\partial B}{\partial p_{q,n}}. \quad (2.5.2)$$

Ako imamo samo jednu česticu, onda suma u (2.5.1) otpada. U slučaju još prostije, jednodimenzionalne čestice, otpada i suma u (2.5.2) i ostaje samo jedan sabirak u (2.5.1).

2.5.2 Osnovni skupovi varijabli i opservabli

Osnovni skup varijabli je definisan u Hamilton-ovoj formi klasične mehanike: ako fizički sistem ima K stepeni slobode, onda se osnovni skup sastoji od K uopštenih koordinata i od K odgovarajućih uopštenih impulsa (kanonično konjugovanih koordinatama). Kao što je poznato, izbor osnovnog skupa varijabli je nejednoznačan. Analognu fundamentalnu ulogu u formalizmu kvantne teorije ima osnovni skup opservabli.

Osnovni skup opservabli u prostoru stanja $\mathcal{H}$ kvantnog sistema je, po definiciji, skup hermitskih operatora za koji su zadovoljeni zahtevi:

a) skup je ireducibilan u $\mathcal{H}$, tj. osim celog $\mathcal{H}$ i njegovog nultog potprostora nijedan drugi njegov potprostor nije invarijantan istovremeno za sve operatore skupa;

b) skup sadrži podskup koji je *kompletan skup kompatibilnih opservabli* u $\mathcal{H}$;

c) mogu da se konstruišu operatorske funkcije osnovnog skupa opservabli pomoću kojih se iz jednog (proizvoljnog) zajedničkog svojstvenog vektora pomenutog kompletnog skupa opservabli mogu *generisati* svi ostali zajednički svojstveni vektori;

d) prostor stanja $\mathcal{H}$ datog kvantnog sistema je *jedinstven* u tom smislu da svaki drugi prostor $\mathcal{H}'$ u kome takođe deluje neki osnovni skup opservabli dobijen kvantizacijom istih klasičnih varijabli mora biti izomorfan sa $\mathcal{H}$, tj. mora biti $\mathcal{H}' = \hat{\mathcal{J}}\mathcal{H}$, gde je $\hat{\mathcal{J}}$ izomorfizam, a pomenuti skup u $\mathcal{H}'$ mora biti ekvivalentan[2.5.1] po $\hat{\mathcal{J}}$ sa osnovnim skupom $\{\hat{A}_k \mid \forall k\}$ u $\mathcal{H}$, tj. mora biti vida $\{\hat{\mathcal{J}}\hat{A}_k\hat{\mathcal{J}}^{-1} \mid \forall k\}$.

2.5.3 Postulat o kvantizaciji varijabli

Pređimo sad na formulaciju samog Postulata V Pojmove pomoću kojih se postulat izražava objasnićemo odmah posle toga.

[2.5.1] Pojam ekvivalentnosti ćemo obilno koristiti u teoriji reprezentovanja u § 2.7-§ 2.9, a ponovo ćemo je susresti u § 6.3.6.

V POSTULAT O KVANTIZACIJI VARIJABLI

Sa klasičnih varijabli fizičkog sistema prelazi se na opservable u prostoru stanja $\mathcal{H}$ sistema tako da pri tome važi:

1) linearna kombinacija varijabli prelazi u istu linearnu kombinaciju odgovarajućih opservabli;

2) proizvod varijabli prelazi u simetrizovani proizvod odgovarajućih opservabli, na primer: $AB \mapsto \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$ (onda u slučaju $[\ A, B\ ]_{\mathrm{PZ}} = 0$ sledi $AB \mapsto \hat{A}\hat{B}$);

3) prelaz je neprekidan, tj. varijabla koja je limes beskonačnog niza varijabli prelazi u opservablu koja je takođe limes niza odgovarajućih opservabli;

4) svaka Poisson-ova zagrada prelazi u komutator odgovarajućih opservabli pomnožen sa $-\frac{\imath}{\hbar}$;

5) osnovni skup varijabli prelazi u osnovni skup opservabli.

Zahtev 4) znači da svaka trojka varijabli A, B, C za koje važi $[\ A, B\ ]_{\mathrm{PZ}} = C$ prelazi u trojku opservabli $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$ tako da

$$-\frac{\imath}{\hbar}[\ \hat{A}, \hat{B}\ ] \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\imath}{\hbar}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \hat{C}. \tag{2.5.3}$$

U zahtevu 5) je naglašena veza osnovnih skupova klasičnih varijabli i kvantnih opservabli. Međutim, kvantna teorija proučava i sisteme za koje pored klasičnih, postoje i tzv. *unutrašnji stepeni slobode* (tako će biti uveden spin u poglavlju § 6.9). U takvim slučajevima, kada klasični analogon sistema ne postoji, osnovni skup opservabli se, u odnosu na osnovni skup varijabli, mora proširiti opservablama relevantnim za unutrašnje stepene slobode.

2.5.4 Uloga konstante $\hbar$ i imaginarne jedinice

Što se tiče faktora $\frac{1}{\hbar}$ u zahtevu 4) Postulata V, moramo u definiciji Poisson-ove zagrade (2.5.1) uočiti da su fizičke dimenzije varijable $[\ A, B\ ]_{\mathrm{PZ}}$ jednake dimenzijama od AB podeljenim sa dimenzijama dejstva. Stoga se i u (2.5.3) u imenitelju mora pojaviti dejstvo. Ispostavlja se da je to baš $\hbar$ i tako fundamentalni kvant dejstva ulazi u formalizam kvantne mehanike. Što se tiče faktora $-\imath$ u zahtevu 4) Postulata V, razlog za to leži u činjenici da je komutator dva hermitska operatora $[\ \hat{A}, \hat{B}\ ]$ uvek kosohermitski operator. (Operator $\hat{C}$ je kosohermitski ako $\hat{C}^\dagger = -\hat{C}$.) Lako je uveriti se da se svaki kosohermitski operator može napisati u vidu $\imath\hat{D}$, gde je $\hat{D}$ neki hermitski operator. Faktor $-\imath$ potire ovo $\imath$, tako da ostaje hermitski operator $\hat{D}$ u $\imath\hat{D} \stackrel{\text{def}}{=} [\ \hat{A}, \hat{B}\ ]$.

2.5.5 Princip korespondencije i matematički smisao postulata

O prelasku sa varijabli na opservable, koji se reguliše Postulatom V, ponekad se govori kao o *kvantizaciji* klasične mehanike (ili njenih varijabli) ili kao o prvoj kvantizaciji (sa tzv. drugom kvantizacijom upoznaćemo se u glavi § 11 ovog udžbenika). Isti prelazak se često naziva i *principom korespondencije* u smislu da Postulat daje preskripciju kako opservable korespondiraju klasičnim varijablama.

Matematički smisao Postulata kvantizacije je u tome da se sa realne Lie-jeve algebre klasičnih varijabli kontinualnim homomorfizmom prelazi na realnu Lie-jevu algebru kosohermitskih operatora, tj., kao što se kaže, nalazi se *linearna reprezentacija* pomenute klasične algebre. Naravno, dok je u Lie-jevoj algebri klasičnih varijabli Lie-jev proizvod realizovan PZ-om, u Lie-jevoj algebri kosohermitskih operatora realizovan je komutatorom. (Obratiti pažnju na činjenicu da kosohermitski operatori, a ne hermitski, čine Lie-jevu algebru.)

Pređimo sad na primenu kvantizacije na najprostiji fizički sistem sa samo jednim stepenom slobode.

2.5.6 Komutaciona relacija koordinate i impulsa

Zamislimo fiktivnu česticu koja postoji u jednodimenzionalnom prostoru duž ose x. Uzećemo najprostiji osnovni skup varijabli: koordinatu x $(-\infty < x < \infty)$ i impuls p_x $(-\infty < p_x < \infty)$. Pretpostavićemo da su ostale varijable analitičke (stoga proizvoljno mnogo puta diferencijabilne) funkcije od x i p_x.

Kao što smo napomenuli u § 2.5.1, PZ-e sad glase:

$$C(x, p_x) \stackrel{\text{def}}{=} [\, A(x, p_x), B(x, p_x) \,]_{\text{PZ}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial B}{\partial p_x} - \frac{\partial A}{\partial p_x}\frac{\partial B}{\partial x}. \tag{2.5.4}$$

Odmah sledi

$$[\, x, p_x \,]_{\text{PZ}} = 1. \tag{2.5.5}$$

Na osnovu Postulata V očekujemo da $\hat{x}$, $\hat{p}_x$ čine osnovni skup opservabli. Iz zahteva 4) Postulata sledi da ovi operatori zadovoljavaju sledeću *osnovnu komutacionu relaciju*:

$$[\, \hat{x}, \hat{p}_x \,] = \imath\hbar, \tag{2.5.6}$$

u šta (2.5.5) prelazi.

2.5.7 Ideja određivanja prostora stanja $\mathcal{H}_x$

Bazirajući se na osnovnoj komutacionoj relaciji (2.5.6), odredićemo Hilbert-ov prostor stanja čestice na x-osi, koji ćemo obeležavati sa $\mathcal{H}_x$.

U stvari počećemo sa pretpostavkom da već imamo $\mathcal{H}_x$ i u njemu skup opservabli $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ koje zadovoljavaju (2.5.6). Pretpostavićemo da je $\hat{x}$ kompletna opservabla (prema drugom zahtevu u definiciji osnovnog skupa opservabli ili $\hat{x}$ ili $\hat{p}_x$ mora biti kompletna opservabla; videćemo niže u § 2.9.1 i § 2.9.2 da je i $\hat{p}_x$ kompletna opservabla).

Posle toga ćemo proučiti svojstveni problem od $\hat{x}$ i, preokrećući potrebne uslove u dovoljne, na osnovu svojstvenog bazisa od $\hat{x}$ odredićemo $\mathcal{H}_x$. Ovaj prostor stanja biće apstraktni prostor[2.5.2].

2.5.8 Operatori, analitičke funkcije operatora i izvod po operatoru

Analitička funkcija opservabli $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ je po definiciji limes polinoma od $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$. Uzmimo kao primer eksponencijalnu operatorsku funkciju $e^{\imath b\hat{p}_x}$ (b realan broj):

$$e^{\imath b\hat{p}_x} \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n}\frac{(\imath b\hat{p}_x)^k}{k!} \tag{2.5.7}$$

(obično se DS od (2.5.7) piše skraćeno kao $\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\imath b\hat{p}_x)^k}{k!}$).

Parcijalni izvod $\frac{\partial\hat{A}(\hat{B},\hat{C},...)}{\partial\hat{B}}$ definiše se na sledeći način:

$$\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{B}} \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{A}(\hat{B}+\varepsilon\hat{I},\hat{C},...)-\hat{A}(\hat{B},\hat{C},...)}{\varepsilon}$$

i postoji ako postoji desna strana. Naravno, totalni izvod se definiše analogno (izostavljajući $\hat{C}$ i eventualne druge opservable i zamenjujući "∂" sa "d").

Zadatak 2.5.1 Pokazati da važi

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}^n}{\mathrm{d}\hat{x}} = n\hat{x}^{n-1}.$$

Ako je $\hat{A}(\hat{x},\hat{p}_x)$ analitička funkcija od $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$, ispostavlja se da se onda izvodi $\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{x}}$ i $\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{p}_x}$ izračunavaju u analogiji sa funkcijama brojeva, na primer[2.5.3]:

$$\frac{\partial}{\partial\hat{x}}\hat{x}^n\hat{p}_x^m = n\hat{x}^{n-1}\hat{p}_x^m.$$

Ali pošto su $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ operatori, mora se održavati redosled pisanja (jer ne komutiraju). Analitička operatorska funkcija poseduje izvode bilo kog reda.

Da bismo mogli da računamo sa operatorima koji su analitičke funkcije potrebna su nam tzv. komutatorska pravila.

[2.5.2] U matematici je apstraktni Hilbert-ov prostor sa datom dimenzijom jedan jedini, određen kompletnim sistemom aksioma. U kvantnoj mehanici međutim, u centru pažnje su izvesne osnovne opservable (a ne samo matematička struktura prostora) i njihov fizički smisao (kojim klasičnim varijablama korespondiraju, kako se mere). Stoga *razlikujemo* apstraktne Hilbert-ove prostore kao prostore stanja (makar i imali istu dimenziju) prema najvažnijim opservablama koje u njemu deluju. Naravno "apstraktnost" prostora je u tome što elementi (tj. vektori) nemaju konkretnu prirodu, označavaju se simbolima, a razlikuju se po svom odnosu prema osnovnim opservablama.

[2.5.3] Na osnovu (2.5.6), na primer: $\frac{\partial\hat{x}\hat{p}_x\hat{x}}{\partial\hat{x}} = \frac{\partial\hat{x}(\hat{x}\hat{p}_x-\imath\hbar)}{\partial\hat{x}} = 2\hat{x}\hat{p}_x-\imath\hbar.$

2.5.9 Komutatorska pravila

Lako je dokazati da iz same definicije komutatora slede sledeća *komutatorska pravila* (važe u svakom $\mathcal{H}$):

$$[\,\hat{A},\hat{B}\,] = -[\,\hat{B},\hat{A}\,], \tag{2.5.8a}$$

$$[\,\hat{A}+\hat{B},\hat{C}\,] = [\,\hat{A},\hat{C}\,]+[\,\hat{B},\hat{C}\,],\ [\,\hat{A},\hat{B}+\hat{C}\,] = [\,\hat{A},\hat{B}\,]+[\,\hat{A},\hat{C}\,], \tag{2.5.8b,c}$$

$$[\,\hat{A}\hat{B},\hat{C}\,] = [\,\hat{A},\hat{C}\,]\hat{B}+\hat{A}[\,\hat{B},\hat{C}\,],\ [\,\hat{A},\hat{B}\hat{C}\,] = [\,\hat{A},\hat{B}\,]\hat{C}+\hat{B}[\,\hat{A},\hat{C}\,], \tag{2.5.8d,e}$$

$$[\,b\hat{A},\hat{B}\,] = b[\,\hat{A},\hat{B}\,],\ [\,\hat{A},b\hat{B}\,] = b[\,\hat{A},\hat{B}\,], \tag{2.5.8f,g}$$

$$[\,\hat{A},[\,\hat{B},\hat{C}\,]\,]+[\,\hat{B},[\,\hat{C},\hat{A}\,]\,]+[\,\hat{C},[\,\hat{A},\hat{B}\,]\,] = 0 \tag{2.5.8h}$$

za svaka tri operatora $\hat{A}$, $\hat{B}$ i $\hat{C}$ i svaki kompleksni broj b. Relacija (2.5.8h) naziva se Jacobijevim identitetom. Takođe se lako dokazuje (metodom totalne indukcije na primer) da važi:

$$[\,\hat{A},\hat{B}^n\,] = \sum_{s=0}^{n-1}\hat{B}^s[\,\hat{A},\hat{B}\,]\hat{B}^{n-s-1} \tag{2.5.9}$$

za svaki pozitivan ceo broj n. Važan specijalni slučaj od (2.5.9) je

$$[\,\hat{A},\hat{A}^n\,] = 0, \forall n. \tag{2.5.10}$$

2.5.10 Komutatori sa analitičkim funkcijama

Teorem 2.5.1 *Neka je $\hat{A}(\hat{x},\hat{p}_x)$ proizvoljna analitička funkcija opservabli $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$. Važe sledeće komutacione relacije:*

$$[\,\hat{x},\hat{A}\,] = \imath\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{p}_x}, \quad [\,\hat{p}_x,\hat{A}\,] = -\imath\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{x}}. \tag{2.5.11a,b}$$

Dokaz: Neka je $\hat{A}$ monom $\hat{x}^m\hat{p}_x^n$. Pišući LS-u od (2.5.11a) kao LS i koristeći se jednakostima (2.5.8e) i (2.5.10), imamo LS $= [\,\hat{x},\hat{x}^m\hat{p}_x^n\,] = \hat{x}^m[\,\hat{x},\hat{p}_x^n\,]$. A jednakosti (2.5.9) i (2.5.6) onda daju LS $== \hat{x}^m\sum_{s=0}^{n-1}\hat{p}_x^s\imath\hbar\hat{p}_x^{n-s-1} = \imath\hbar\hat{x}^m(n\hat{p}_x^{n-1}) = \imath\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{p}_x}\hat{x}^m\hat{p}_x^n =$ DS. Zbog (2.5.8c) i (2.5.8g) sada (2.5.11a) sledi za svaku opservablu $\hat{A}$ koja je polinom, tj. linearna kombinacija monoma.
U poslednjem koraku dokaza moramo se koristiti limesom polinoma da bismo (2.5.11a) proširili na sve analitičke funkcije. Da su $\hat{x}$ i $\frac{\partial}{\partial\hat{p}_x}$ neprekidni operator odnosno operacija, ovaj korak bi bio očigledan. Ali, kao što ćemo kasnije videti, oni nisu neprekidni. Dokaz se može dovršiti na osnovu pojma zatvorenosti hermitskih operatora (eventualno videti primedbu 6.4.3), ali mi u to ovde nećemo ulaziti. (2.5.11b) se dokazuje analogno. *Q. E. D.*

Zadatak 2.5.2 Pokazati da je svaka analitička funkcija $\hat{A}(\hat{x},\hat{p}_x)$ koja komutira sa operatorom $\hat{x}$ u $\mathcal{H}$, nužno funkcija samo od $\hat{x}$.

Zadatak 2.5.3 Neka je $\hat{B} = \sum_n b_n \mid n\,\rangle\langle n\mid$ kompletna opservabla u spektralnom vidu. Neka $[\,\hat{A},\hat{B}\,] = 0$. Pokazati da postoji funkcija f (i izraziti je tabelarno) takva da $\hat{A} = f(\hat{B})$. (Indikacija: iskoristiti S 2.4.3).

2.5.11 Svojstveni problem opservable koordinate

Neka je $\mid x\rangle$ svojstveni vektor (pravi ili uopšteni) opservable $\hat{x}$ (da ovakav vektor sigurno postoji sledi iz (2.3.13)), za svojstvenu vrednost x:

$$\hat{x}\mid x\rangle = x\mid x\rangle, \tag{2.5.12}$$

gde je $\mid x\rangle$ uopšteni vektor iz $\mathcal{U}(\mathcal{H}_x)$).

Definišimo sledeću familiju operatora

$$\hat{U}(q) \stackrel{\text{def}}{=} e^{-\frac{\imath}{\hbar}q\hat{p}_x}, \quad -\infty < q < \infty. \tag{2.5.13}$$

Pošto je $\hat{U}^\dagger(q) = e^{\frac{\imath}{\hbar}q\hat{p}_x} = \hat{U}^{-1}(q)$ (uporediti (2.5.7)), radi se o unitarnim operatorima u $\mathcal{H}_x$. U natprostoru $\mathcal{U}(\mathcal{H}_x)$ unitarni operatori deluju kao nesingularni operatori. Pitamo se da li je i $\hat{U}(q)\mid x\rangle$ rešenje svojstvenog problema od $\hat{x}$.

Iz formule (2.5.11a) u Teoremu sledi $[\,\hat{x},\hat{U}(q)\,] = \imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}(q)}{\mathrm{d}\hat{p}_x} = q\hat{U}(q)$ ili

$$\hat{x}\hat{U}(q) = \hat{U}(q)(\hat{x}+q). \tag{2.5.14}$$

Primenjujući ovu operatorsku jednakost na $\mid x\rangle$, iz (2.5.12) sledi

$$\hat{x}(\hat{U}(q)\mid x\rangle) = (x+q)(\hat{U}(q)\mid x\rangle). \tag{2.5.15}$$

Jednakost (2.5.15) znači da je i $\hat{U}(q)\mid x\rangle$ rešenje svojstvenog problema od $\hat{x}$ i to za svojstvenu vrednost $x+q$. $\hat{U}(q)\mid x\rangle$ ne može biti pravi vektor, jer onda bi i $\mid x\rangle = \hat{U}^{-1}(q)(\hat{U}(q)\mid x\rangle)$ morao biti pravi vektor jednake norme (jer i $U^{-1}(q) = \hat{U}(-q)$ je unitaran operator), a nije. Znači, i $x+q$ pripada kontinualnom spektru. Pošto sve ovo važi za svaki realni broj q, *kontinualni spektar od $\hat{x}$ je cela realna osa.*

Postavlja se pitanje da li $\hat{x}$ uopšte ima i diskretnih svojstvenih vrednosti ili mu je spektar čisto kontinualan. Pokazaćemo da je $\hat{x}$ opservabla sa *čisto kontinualnim spektrom* uzimajući, kao pokušaj, $\mathcal{H}_x \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_k$ tj. izjednačavajući $\mathcal{H}_x$ sa prostorom koji odgovara kontinualnom spektru od $\hat{x}$ (uporediti (2.3.12a) i uspevajući da konstruišemo operator $\hat{p}_x$ u tom prostoru (u § 2.5.15). Onda je prema tački a) u definiciji osnovnog skupa opservabli (u § 2.5.3) jasno da $\hat{x}$ nema diskretni spektar. Naime, ako bi ga imao, onda bi prema (2.3.12a) $\mathcal{H}_x$ bio jednak $\mathcal{H}_k \oplus \mathcal{H}_d$, a sam $\mathcal{H}_k$ bi bio netrivijalan invarijantan potprostor za $\hat{x}, \hat{p}_x$ u protivurečnosti sa zahtevom ireducibilnosti osnovnog skupa.

2.5.12 Neke matematičke osobine operatora $\hat{x}$

U teoriji Hilbert-ovih prostora dokazuje se sledeći stav.

Stav 2.5.1 *Sledeće četiri osobine hermitskog operatora $\hat{A}$ su ekvivalentne:*

a) operator $\hat{A}$ je neprekidan, tj. iz $\psi_n \to \psi$, $n \to \infty$ sledi $\hat{A}\psi_n \to \hat{A}\psi$, $n \to \infty$;

b) operator $\hat{A}$ je ograničen tj. postoji konačan pozitivan broj C tako da važi $\|\hat{A}\psi\| < C\|\psi\|$, $\forall\psi \in \mathcal{H}$ (C ne zavisi od izbora ψ);

c) spektar operatora $\hat{A}$ je ograničen, tj. postoji $C < \infty$ tako da sav spektar leži u intervalu $[-C, C]$.

d) operator $\hat{A}$ je svugde definisan, tj. domen mu je ceo prostor $\mathcal{H}$.

Pošto operator koordinate $\hat{x}$ ima celu realnu osu kao svoj spektar, za njega ne važi c). Stoga $\hat{x}$ nije ograničen operator, nije neprekidan i nije svugde definisan.

2.5.13 Određivanje prostora $\mathcal{H}_x$

Kao što smo rekli u paragrafu § 2.5.6, pretpostavićemo da je $\hat{x}$ u $\mathcal{H}_x$ kompletna opservabla, tj. da su joj svi (uopšteni) svojstveni vektori $|\, x \,\rangle$ nedegenerisani. Pošto je kontinualni spektar od $\hat{x}$ cela realna osa, svakom realnom broju x odgovara $|\, x \,\rangle$.

Da ne bi fazni faktor bio proizvoljan za svaku vrednost x nezavisno, uzećemo proizvoljni fazni faktor samo za $|\, x = 0 \,\rangle$, a ostale vektore $|\, x \neq 0 \,\rangle$ ćemo definisati pomoću jednakosti

$$\boxed{|\, x \,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}(x) \,|\, x = 0 \,\rangle, \quad -\infty < x < \infty}, \tag{2.5.16}$$

gde je $\hat{U}(x) \stackrel{\text{def}}{=} e^{-\frac{i}{\hbar} x \hat{p}_x}$.

Odsad ćemo podrazumevati da svojstveni bazis

$$\boxed{\{|\, x \,\rangle \mid -\infty < x < \infty\}} \tag{2.5.17}$$

opservable koordinate $\hat{x}$ u $\hat{U}(\mathcal{H}_x)$ ima usklađene fazne faktore u smislu (2.5.16). U stvari ceo bazis ima jedan zajednički otvoren (tj. proizvoljan) fazni faktor.

Zadatak 2.5.4 Pokazati da umesto faznog faktora od $|\, x = 0 \,\rangle$ može biti proizvoljan fazni faktor bilo kog drugog vektora $|\, x \neq 0 \,\rangle$ (ali samo jednog) iz (2.5.17). Prethodno dokazati da važi

$$|\, x' \,\rangle = \hat{U}(x - x') \,|\, x \,\rangle. \tag{2.5.18}$$

U neophodnost fazne konvencije uverićemo se u odeljku § 2.7, koji je posvećen teoriji reprezentovanja. Naime, nije moguće jednoznačno reprezentovanje u bazisu (2.5.17) ako makar i dva bazisna vektora imaju uzajamno nezavisne proizvoljne fazne faktore.

Sve linearne kombinacije, uključujući i integrale, i limesi linearnih kombinacija uopštenih vektora $|\, x \,\rangle$, $-\infty < x < \infty$ sačinjavaju $\mathcal{U}(\mathcal{H}_x)$. Može se pokazati da vektori vida[2.5.4]

$$\boxed{|\, \psi \,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \,|\, x \,\rangle \, \mathrm{d}x, \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x < \infty}, \tag{2.5.19a,b}$$

čine Hilbert-ov prostor, a to upravo i jeste *prostor stanja $\mathcal{H}_x$ jednodimenzionalne čestice*, koji smo time odredili.

[2.5.4] Strogo uzev, integral u (2.5.19) u stvari nije obični (tj. tzv. Riemannov integral), već tzv. Lebesgue-ov (čitati Lebegov) integral koji se zasniva na Lebesgueovoj meri (uopštenju pojma dužine intervala). Po želji, više o tome videti u monumentalnom delu o zasnivanju kvantne mehanike: John von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, 1955 (prevod sa nemačkog).

2.5.14 Delovanje operatora $\hat{x}$

Pošto je proizvoljni vektor $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}_x$ dat sa (2.5.19), delovanje operatora $\hat{x}$ može se definisati na sledeći način:

$$\hat{x}\,|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\hat{x}\,|\,x\,\rangle\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)x\,|\,x\,\rangle\,\mathrm{d}x \tag{2.5.20a}$$

i $\hat{x}\,|\,\psi\,\rangle$ je definisano u $\mathcal{H}_x$, tj. $|\,\psi\,\rangle$ spada u domen od $\hat{x}$, ako i samo ako

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 |x|^2\,\mathrm{d}x < \infty, \tag{2.5.20b}$$

Zadavši način delovanja i domen, u potpunosti[2.5.5] smo definisali $\hat{x}$ u $\mathcal{H}_x$.

2.5.15 Delovanje operatora $\hat{p}_x$

Naš zadatak nije u potpunosti ostvaren dok ne saznamo kako operator $\hat{p}_x$ deluje na vektore $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}_x$ i dok se ne osvedočimo da važi osnovna komutaciona relacija $[\,\hat{x}, \hat{p}_x\,] = \imath\hbar$ (da bismo se ubedili u konzistentnost našeg određivanja prostora $\mathcal{H}_x$). Izvešćemo prvo kako operator $\hat{U}(q)$, definisan sa (2.5.13), deluje na $|\,\psi\,\rangle$:

$$\hat{U}(q)\,|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\hat{U}(q)\,|\,x\,\rangle\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\,|\,x+q\,\rangle\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x-q)\,|\,x\,\rangle\,\mathrm{d}x \tag{2.5.21}$$

(u poslednjem koraku smo zamenili $x' \stackrel{\mathrm{def}}{=} x+q$ i umesto x' ponovo pisali x).

Pretpostavimo da je q infinitezimalno malo i obeležimo ga sa ε. Onda je $\hat{U}(\varepsilon) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\varepsilon\hat{p}_x} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\frac{\imath}{\hbar}\hat{p}_x\varepsilon)^n}{n!} \approx 1 - \frac{\imath}{\hbar}\varepsilon\hat{p}_x$. Ova približna jednakost daje

$$\hat{p}_x \approx -\frac{\imath\hbar}{\varepsilon}(1-\hat{U}(\varepsilon)). \tag{2.5.22}$$

Iz (2.5.22) i (2.5.21) sada sledi

$$\hat{p}_x\,|\,\psi\,\rangle \approx -\imath\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\psi(x)-\psi(x-\varepsilon)}{\varepsilon}\,|\,x\,\rangle\,\mathrm{d}x = -\imath\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\psi(x+\varepsilon)-\psi(x)}{\varepsilon}\,|\,x\,\rangle\,\mathrm{d}x \tag{2.5.23}$$

(ε smo zamenili sa $-\varepsilon$). Znak približne jednakosti se odnosi na ε, koji je u stvari nulti niz. Pošto LS od (2.5.23) ne zavisi od ovog graničnog procesa, možemo na DS-i uzeti $\lim_{\varepsilon\to 0}$. Tako najzad dolazimo do rezultata:

$$\hat{p}_x\,|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} [-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)]\,|\,x\,\rangle\,\mathrm{d}x, \tag{2.5.24a}$$

a $|\,\psi\,\rangle$ spada u domen od $\hat{p}_x$ ako i samo ako je $\psi(x)$ diferencijabilna funkcija na celoj realnoj osi i (videti primedbu 2.5.5)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |-\imath\hbar\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x < \infty. \tag{2.5.24b}$$

[2.5.5] Ako čitaoca zanimaju dokazi gornjih iskaza ili više detalja o neograničenim operatorima $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ u $\mathcal{H}_x$ može da konsultuje von Neumann-ovu knjigu navedenu u Primedbi 2.5.4 i to str. 90 i 147.

Zadatak 2.5.5 Pokazati da u $\mathcal{H}_x$ ne postoji nijedan netrivijalan potprostor koji je invarijantan za $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$ istovremeno.

Zadatak 2.5.6 Pokazati da važi $[\,\hat{x}, \hat{p}_x\,] \mid \psi\,\rangle = \imath\hbar \mid \psi\,\rangle$ za svaki vektor $\mid \psi\,\rangle$ iz domena komutatora od $\hat{x}$ i $\hat{p}_x$.

Zadatak 2.5.7 Pokazati da iz pretpostavke da je vektor $\mid x_0\,\rangle$ svojstveni vektor od $\hat{x}$, tj. $\hat{x} \mid x_0\,\rangle = x_0 \mid x_0\,\rangle$, i da je $\mid x_0\,\rangle$ u domenu operatora $[\,\hat{x}, \hat{p}_x\,]$ sledi protivurečnost.

2.5.16 Završne napomene

Dakle, izgradili smo $\mathcal{H}_x$ preko uopštenog svojstvenog bazisa $\{\mid x\rangle \mid -\infty < x < \infty\}$ opservable $\hat{x}$. Pošto je $\mathcal{H}_x$ *apstraktan prostor*, njegovi elementi, naravno, nemaju konkretnu prirodu (za razliku od prostora brojnih kolona i prostora funkcija na koje ćemo naići u teoriji reprezentovanja u § 2.7-§ 2.9). U takvom prostoru sve je dato preko uzajamnih odnosa. Najprirodnije je elemente zadavati preko njihovog odnosa prema jednom fiksiranom bazisu, kao što je pomenuti bazis u $\mathcal{H}_x$.

Kao što smo videli u zahtevu d) definicije pojma osnovnog skupa opservabli (u § 2.5.3), prostor stanja mora biti *jedinstven*. Baš činjenica da je $\mathcal{H}_x$ zadan preko bazisa čini jedinstvenost lako uočljivom: ako bismo konstruisali drugi prostor $\mathcal{H}'_x$ sa analognim bazisom $\{\mid x\rangle' \mid -\infty < x < \infty\}$, traženi izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}$ (koji "izjednačuje" ta dva prostora) bi bio definisan sledećom jednakošću

$$\hat{\mathcal{J}} \mid x\,\rangle = \mid x\,\rangle', \quad -\infty < x < \infty \tag{2.5.25}$$

i lako je videti da bi $\hat{\mathcal{J}}$ stvarno transformacijom sličnosti prevodio osnovni skup $\hat{x}$, $\hat{p}_x$ iz $\mathcal{H}_x$ u analogni osnovni skup u $\mathcal{H}'_x$.

2.6 Izgradnja prostora stanja za jednu i više realnih čestica

U ovom odeljku ćemo izgraditi prostor stanja realne trodimenzionalne čestice, kao i sistema od N čestica. Ispostaviće se da direktni proizvod faktor prostora stanja predstavlja adekvatan kvantno-mehanički metod za opisivanje kompozicije fizičkih podsistema u nadsistem, bez obzira da li se radi o materijalnim podsistemima ili o stepenima slobode. Ovim metodom izvršićemo kompoziciju stepena slobode čestice duž x, y i z-ose, kao i kompoziciju pojedinih čestica u višečestični sistem.

2.6.1 Osnovne komutacione relacije

U klasičnoj fizici prostor stanja jedne čestice, tj. njen fazni prostor, ima šest koordinata: x, y, z, p_x, p_y, p_z ili skraćeno $\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$. Radi kvantizacije ovih varijabli moramo izračunati sve PZ-e među njima. Koristeći se obrascima (2.5.1) i (2.5.2), lako je uveriti se da rezultat glasi

$$[\,x, p_x\,]_{\mathrm{PZ}} = 1, \;\; [\,y, p_y\,]_{\mathrm{PZ}} = 1, \;\; [\,z, p_z\,]_{\mathrm{PZ}} = 1, \tag{2.6.1a,b,c}$$

a da su ostalih 12 PZ-a jednake nuli.

Zadatak 2.6.1 Dokazati (2.6.1) i pomenutih ostalih 12 PZ-a.

Kvantno-mehanički prostor stanja jedne trodimenzionalne tj. realne čestice nazivaćemo *orbitnim prostorom stanja*[2.6.1] i obeležavaćemo ga sa $\mathcal{H}_o$. To će biti Hilbert-ov prostor u kome su definisane tri opservable koordinata $\hat{x}$, $\hat{y}$ i $\hat{z}$ i tri opservable komponenti impulsa $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ i $\hat{p}_z$, koje zadovoljavaju komutacione relacije

$$[\,\hat{x},\hat{p}_x\,] = \imath\hbar,\ \ [\,\hat{y},\hat{p}_y\,] = \imath\hbar,\ \ [\,\hat{z},\hat{p}_z\,] = \imath\hbar, \qquad (2.6.2a,b,c)$$

a ostalih 12 komutatora je jednako nuli (kao što sledi kvantizacijom (2.6.1) itd.).

Kao i u vektorskoj algebri u klasičnoj fizici, trojku operatora $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ u $\mathcal{H}_o$ pisaćemo skraćeno kao $\hat{\mathbf{r}}$ i nazivaćemo je *vektorskim operatorom* koordinata ili radijus vektora i isto tako $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ ćemo zajedno pisati kao $\hat{\mathbf{p}}$, tj. kao vektorski operator impulsa. Povremeno ćemo umesto o vektorskom operatoru govoriti o vektorskoj opservabli.

U stvari, vektorski operatori nisu tri bilo koja operatora, već tri operatora koja imaju određene transformacione osobine pri prelasku sa jednog koordinatnog sistema na drugi koji je zarotiran u odnosu na prvi (kao i u klasičnoj fizici). Precizniju definiciju vektorskog operatora daćemo tek u § 7.4.2, nakon što ovladamo operatorima rotacije u $\mathcal{H}_o$.

2.6.2 Razlaganje osnovnog skupa opservabli i uloga direktnog proizvoda prostora stanja

U prethodnom odeljku u slučaju problema jednodimenzionalne čestice videli smo da su opservable $\hat{x}$, $\hat{p}_x$ činile osnovni skup i definisale $\mathcal{H}_x$. Analognim rezonovanjem može se pokazati da šest opservabli $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$ čine osnovni skup za trodimenzionalnu česticu (tri opservable $\hat{\mathbf{r}}$ čine kompletan skup kompatibilnih opservabli). Prema tome, ove opservable definišu orbitni prostor stanja $\mathcal{H}_o$.

Umesto da ovaj put pređemo ponovo na složeniji način, možemo postići isti rezultat kraticom. Operatori pomenutog osnovnog skupa u $\mathcal{H}_o$ mogu da se grupišu u tri klase, $\{\hat{x},\hat{p}_x\}$, $\{\hat{y},\hat{p}_y\}$, $\{\hat{z},\hat{p}_z\}$ tako da:

i) svaki operator u jednoj klasi komutira sa svakim operatorom iz svake druge klase,

ii) svaka klasa je osnovni skup opservabli.

Ovo je karakteristično za razlaganje sistema na *podsisteme* (imamo tri podsistema u našem slučaju). Ovde se ne radi o materijalnim podsistemima, kao što su na primer čestice u sistemu od više čestica, već o podsistemima koji su *stepeni slobode*. I u klasičnoj fizici možemo tri koordinate da smatramo za tri stepena slobode čestice.

U kvantnoj mehanici se slaganje fizičkih podsistema u nadsistem vrši putem tzv. *direktnog proizvoda* (ili tenzorskog ili Kronecker-ovog proizvoda) Hilbert-ovih prostora koji su prostori stanja podsistema.

[2.6.1] Razlog zašto se prostorni deo Hilbert-ovog prostora stanja jedne čestice naziva "orbitnim" (za razliku od, na primer, spinskog, koji ćemo upoznati u odeljku § 6.10) je verovatno istorijski, vezan za orbite elektrona u omotaču atoma.

2.6.3 Matematički podsetnik — direktni proizvod Hilbert-ovih prostora

Sad ćemo ukratko podsetiti na osnovne ideje direktnog proizvoda Hilbert-ovih prostora.

Neka su $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \ldots, \mathcal{H}_n$ i $\mathcal{H}$ $n+1$ zadatih Hilbert-ovih prostora takvih da je dimenzija od $\mathcal{H}$ proizvod dimenzija svih prethodnih prostora. Kaže se da je $\mathcal{H}$ direktni proizvod prostora $\mathcal{H}_1, ..., \mathcal{H}_n$ i piše se

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n \tag{2.6.3}$$

ako je zadato jedno *preslikavanje* skupovnog proizvoda $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \times \cdots \times \mathcal{H}_n$ (tj. skupa svih n-torki $\{|\,\psi_1\,\rangle, |\,\psi_2\,\rangle, \ldots, |\,\psi_n\,\rangle\}$, $|\,\psi_i\,\rangle \in \mathcal{H}_i$, $i = 1, 2, \ldots, n$) u $\mathcal{H}$ tako da zadovoljava tri niže navedena zahteva. Likovi ovog preslikavanja pišu se u vidu

$$|\,\psi_1\,\rangle \otimes |\,\psi_2\,\rangle \otimes \cdots \otimes |\,\psi_n\,\rangle \tag{2.6.4}$$

ili skraćeno kao $|\,\psi_1\,\rangle\,|\,\psi_2\,\rangle \cdots |\,\psi_n\,\rangle$ ili čak kao $|\,\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n\,\rangle$, a nazivaju se *nekorelisanim vektorima* prostora $\mathcal{H}$.

Zahtevi na preslikavanje formulišu se pomoću nekorelisanih vektora i glase.

I) *linearnost* po svakom faktoru:

$$\begin{aligned}
&(\sum_{j_1=1}^{J_1} b_{j_1}\,|\,\psi_{j_1}\,\rangle) \otimes (\sum_{j_2=1}^{J_2} b_{j_2}\,|\,\psi_{j_2}\,\rangle) \otimes \cdots \otimes (\sum_{j_n=1}^{J_n} b_{j_n}\,|\,\psi_{j_n}\,\rangle) = \\
&\sum_{j_1=1}^{J_1} \sum_{j_2=1}^{J_2} \cdots \sum_{j_n=1}^{J_n} b_{j_1} b_{j_2} \cdots b_{j_n}\,|\,\psi_{j_1}\,\rangle\,|\,\psi_{j_2}\,\rangle \cdots |\,\psi_{j_n}\,\rangle;
\end{aligned} \tag{2.6.5a}$$

II) *multiplikativnost* skalarnih proizvoda nekorelisanih vektora:

$$(|\,\psi_1\,\rangle\,|\,\psi_2\,\rangle \cdots |\,\psi_n\,\rangle, |\,\varphi_1\,\rangle\,|\,\varphi_2\,\rangle \cdots |\,\varphi_n\,\rangle) = \langle\,\psi_1\,|\,\varphi_1\rangle\langle\,\psi_2\,|\,\varphi_2\rangle \cdots \langle\,\psi_n\,|\,\varphi_n\rangle, \tag{2.6.5b}$$
$$\forall\,|\,\psi_1\,\rangle, |\,\varphi_1\,\rangle \in \mathcal{H}_1, \ldots \forall\,|\,\psi_n\,\rangle, |\,\varphi_n\,\rangle \in \mathcal{H}_n$$

(skalarni proizvod na LS-i od (2.6.5b) definisan je u $\mathcal{H}$; a skalarni proizvod na DS-i dati su u $\mathcal{H}_1$, odnosno u $\mathcal{H}_2$, ... odnosno u $\mathcal{H}_n$);

III) nekorelisani vektori *obrazuju ceo* $\mathcal{H}$; drugim rečima, vektor iz $\mathcal{H}$ je u najopštijem slučaju limes linearnih kombinacija nekorelisanih vektora, tj. vida

$$|\,\psi\,\rangle = \lim_{K\to\infty} \sum_{k=1}^{K} b_k\,|\,\psi_1^{(k)}\,\rangle \cdots |\,\psi_n^{(k)}\,\rangle. \tag{2.6.5c}$$

Ako se vektor iz $\mathcal{H}$ ne može napisati u vidu (2.6.4) (već samo u vidu (2.6.5c), eventualno bez limesa), kaže se da je *korelisan* (razlog ćemo videti u § 4.4). Hilbert-ovi prostori $\mathcal{H}_i$ $i = 1, 2, .., n$ u (2.6.3) nazivaju se *faktor prostorima*, a $\mathcal{H}$ se naziva *kompozitnim prostorom*.

Ako je bar jedan od vektora koji se pojavljuju kao faktori u (2.6.4) nulti vektor, onda je i ceo proizvod *nulti vektor* u $\mathcal{H}$, kao što odmah sledi iz zahteva linearnosti. Ako su svi faktori nenulti

vektori i tenzorski proizvod je nenulti vektor. Ovo se lako vidi razvijanjem svakog vektora po nekom bazisu (videti sledeći pasus).

Neka su $\{| k_i \rangle \mid \forall k_i\}$ proizvoljni bazisi u faktor prostorima $\mathcal{H}_i$ $i = 1, 2, ..., n$. Onda kao posledica zahteva II) i III), skup nekorelisanih vektora $\{| k_1 \rangle \cdots | k_n \rangle \mid \forall k_i,\ i = 1, ..., n\}$ je *bazis* u $\mathcal{H}$. Kaže se da pomenuti bazisi u $\mathcal{H}_i$ *indukuju* ovaj bazis u $\mathcal{H}$ ili da se (direktnim proizvodom) množe u njega.

Pretpostavimo da su $\hat{A}_i$ $i = 1, ..., n$ proizvoljni operatori u faktor prostorima $\mathcal{H}_i$ (svi su linearni ili svi su antilinearni). Takozvani *direktni proizvod* ovih *operatora* $\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{A}_n$ po definiciji na sledeći način deluje na nekorelisane vektore:

$$(\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{A}_n)(| \psi_1 \rangle \mid \psi_2 \rangle \cdots \mid \psi_n \rangle) = (\hat{A}_1 \mid \psi_1 \rangle) \cdots (\hat{A}_n \mid \psi_n \rangle), \tag{2.6.6}$$

a korelisani vektori u $\mathcal{H}$ se prvo razvijaju po nekorelisanima, a onda operator $\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{A}_n$ deluje na pojedine sabirke.

Neka je $\hat{A}_1$ operator u faktor prostoru $\mathcal{H}_1$. On se *prenosi* u kompozitni prostor $\mathcal{H}$ tako što postaje operator $\hat{A}_1 \otimes \hat{I}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{I}_n$, gde su $\hat{I}_i$ identični operatori u $\mathcal{H}_i$, $i = 2, 3, ..., n$. Uobičajeno je da se radi jednostavnosti i dalje piše samo $\hat{A}_1$, a po kontekstu se vidi da li deluje u $\mathcal{H}_1$ ili u $\mathcal{H}$. Analogno važi za prenošenje operatora iz ostalih faktor prostora u kompozitni prostor.

Očigledno, bilo koji preneseni operator iz jednog faktor prostora *komutira* sa bilo kojim prenesenim operatorom iz bilo kog drugog faktor prostora, jer deluju na različite faktore u (2.6.4), kao što se vidi iz (2.6.6).

Kompozitni prostor nije uvek unapred zadat. On se može *odrediti* na primer tako što se fiksira u faktor prostorima po jedan bazis $\{| k_i \rangle \mid \forall k_i,\ i = 1, ..., n\}$, a $\mathcal{H}$ će biti po definiciji Hilbert-ov prostor koji obrazuje indukovani bazis $\{| k_1 \rangle \cdots | k_n \rangle \mid \forall k_i,\ i = 1, ..., n\}$. Reizbor bazisa u faktor prostorima daje prostor izomorfan sa $\mathcal{H}$, tj. određivanje je jednoznačno s tačnošću do izomorfizma.

2.6.4 Određivanje orbitnog prostora stanja $\mathcal{H}_o$

Vratimo se sada, naoružani pogodnim matematičkim aparatom, našem zadatku da odredimo $\mathcal{H}_o$.

U prethodnom odeljku odredili smo prostor $\mathcal{H}_x$ polazeći od osnovnog skupa opservabli $\hat{x}, \hat{p}_x$. Potpuno analogno određujemo $\mathcal{H}_y$ na osnovu $\hat{y}, \hat{p}_y$ i $\mathcal{H}_z$ na osnovu $\hat{z}, \hat{p}_z$. Orbitni prostor stanja čestice $\mathcal{H}_o$ onda definišemo kao direktni proizvod prostora:

$$\boxed{\mathcal{H}_o = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z}. \tag{2.6.7}$$

Operatori $\hat{x}, \hat{p}_x$; $\hat{y}, \hat{p}_y$; $\hat{z}, \hat{p}_z$ deluju u faktor prostorima $\mathcal{H}_x$ odnosno $\mathcal{H}_y$ odnosno $\mathcal{H}_z$ i jednakost (2.6.7) ne bi bila konzistentna da nismo kvantizacijom klasičnih varijabli $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$ dobili potrebno komutiranje (uporediti pretposlednji pasus u § 2.6.2).

U orbitnom prostoru $\mathcal{H}_o$ *potpuni skup kompatibilnih opservabli* $\hat{\mathbf{r}} \stackrel{\text{def}}{=} \{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$ ima zajedničke uopštene svojstvene vektore vida

$$| \mathbf{r} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} | x \rangle \otimes | y \rangle \otimes | z \rangle. \tag{2.6.8}$$

Drugim rečima, svojstveni bazis od $\hat{x}$ u $\mathcal{H}_x$, svojstveni bazis od $\hat{y}$ u $\mathcal{H}_y$ i svojstveni bazis od $\hat{z}$ u $\mathcal{H}_z$, indukuju zajednički svojstveni bazis od $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ u $\mathcal{H}_o$:

$$\{| x \rangle \otimes | y \rangle \otimes | z \rangle \mid -\infty < q < \infty,\ q = x, y, z\} \stackrel{\text{def}}{=} \{| \mathbf{r} \rangle \mid \forall \mathbf{r}\}. \tag{2.6.9}$$

Da podsetimo i na to da po našoj konvenciji (2.5.16) $|\,\mathbf{r}=0\,\rangle$ ima proizvoljno fiksirani fazni faktor, a svi ostali uopšteni vektori bazisa (2.6.9) su onda jednoznačno definisani pomoću

$$|\,\mathbf{r}\,\rangle = \hat{U}_x(x)\otimes\hat{U}_y(y)\otimes\hat{U}_z(z)\,|\,\mathbf{r}=0\,\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}}\,|\,\mathbf{r}=0\,\rangle. \tag{2.6.10}$$

(Treba zapaziti da su x, y, z realni brojevi, osim u indeksu operatora $\hat{U}$, gde imaju simbolično značenje i ukazuju na to u kom faktor prostoru $\mathcal{H}_q$, $q = x, y, z$, deluje operator $\hat{U}$.)

2.6.5 Delovanje osnovnog skupa opservabli u $\mathcal{H}_o$

Elementi prostora $\mathcal{H}_o$ su one kontinualne (tj. integralom izražene) linearne kombinacije

$$|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(\mathbf{r})\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r} \tag{2.6.11a}$$

za koje važi

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(\mathbf{r})|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r} < \infty. \tag{2.6.11b}$$

Delovanje operatora iz osnovnog skupa $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$ u $\mathcal{H}_o$ je sledeće:

$$\hat{x}\,|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} x\psi(\mathbf{r})\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r},\ \hat{y}\,|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} y\psi(\mathbf{r})\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{2.6.12a}$$

$$\hat{z}\,|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} z\psi(\mathbf{r})\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r},\ \hat{p}_x\,|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}[-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(\mathbf{r})]\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{2.6.12b}$$

$$\hat{p}_y\,|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}[-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial y}\psi(\mathbf{r})]\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r},\ \hat{p}_z\,|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}[-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial z}\psi(\mathbf{r})]\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r}. \tag{2.6.12c}$$

Vektor $|\,\psi\,\rangle$ spada u domen od $\hat{x}$ ako i samo ako

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} x^2|\psi(\mathbf{r})|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r} < \infty \tag{2.6.13}$$

i analogno za $\hat{y}$ i $\hat{z}$.

Vektor $|\,\psi\,\rangle$ spada u domen od $\hat{p}_x$ ako i samo ako je odgovarajuća funkcija $\psi(\mathbf{r})$ iz (2.6.11a) diferencijabilna po x duž cele ose i

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|-\imath\hbar\tfrac{\partial}{\partial x}\psi(\mathbf{r})|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r} < \infty. \tag{2.6.14}$$

Analogno važi za $\hat{p}_y$ i $\hat{p}_z$.

2.6.6 Orbitni prostor stanja i različite čestice

Kvantna mehanika ima u stvari samo jedan orbitni prostor stanja $\mathcal{H}_o$ za sve čestice (s tačnošću do izomorfizma, zapravo ekvivalentnosti ako imamo u vidu osnovni skup opservabli). Stanja elektrona, protona, neutrona itd. su vektori u ekvivalentnim prostorima $\mathcal{H}_o$.

I u klasičnoj fizici je jedan te isti fazni prostor opisivao bilo koju materijalnu tačku. Ali tamo i nije bilo potrebe razlikovati materijalne tačke, osim po masi.

U kvantnoj mehanici moramo čestice da razlikujemo po mnogim neklasičnim unutrašnjim osobinama ("unutrašnjim" u odnosu na prostorno-vremensko stanje). Nameće se pitanje kako se u kvantnoj mehanici vodi računa o ovom stanju stvari.

Videćemo da se različitim česticama pripisuju različiti unutrašnji faktor-prostori stanja, koji opisuju različite unutrašnje stepene slobode (videti Postulat o unutrašnjim stepenima slobode u § 6.9.6). Tu će pre svega doći spinski faktor prostor (§ 6.10.2), a zatim i drugi faktor prostori.

2.6.7 Klasični prostor stanja za više čestica

Prostor stanja sistema od N čestica u klasičnoj mehanici je fazni prostor sistema, tj. skup svih mogućih vrednosti varijabli $\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N$ ($6N$ varijabli). Za kvantizaciju faznog prostora opet moramo izračunati sve PZ-e (uporediti (2.5.1) i (2.5.2)).

Zadatak 2.6.2 Pokazati da je PZ proizvoljne analitičke funkcije od $\mathbf{r}_i$ i $\mathbf{p}_i$ sa svakom analitičkom funkcijom od $\mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j$ ako $i \neq j$ jednaka nuli.

2.6.8 Kvantno-mehanički prostor stanja za više čestica $\mathcal{H}^{(o)}_{1...N}$

Nakon kvantizacije, opservable $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{p}}_1; ...; \hat{\mathbf{r}}_N, \hat{\mathbf{p}}_N$ će da se grupišu u N klasa tako da svaka opservabla iz jedna klase komutira sa svakom opservablom iz svake druge klase, a klase su osnovni skupovi opservabli.

Ako sa $\mathcal{H}^{(o)}_n$ označimo orbitni Hilbert-ov prostor n-te čestice, $n = 1, 2, ..., N$, onda je orbitni prostor stanja $\mathcal{H}^{(o)}_{1...N}$ celog sistema definisan kao direktni proizvod:

$$\boxed{\mathcal{H}^{(o)}_{1...N} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}^{(o)}_1 \otimes \mathcal{H}^{(o)}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}^{(o)}_N}. \tag{2.6.15}$$

Zajednički svojstveni bazis potpunog skupa kompatibilnih opservabli $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, ..., \hat{\mathbf{r}}_N$ u $\mathcal{H}^{(o)}_{1...N}$ glasi

$$\{| \, \mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N \, \rangle \mid \forall \mathbf{r}_n, \ n = 1, ..., N\}, \tag{2.6.16a}$$

gde smo uveli skraćenu oznaku

$$| \, \mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N \, \rangle \stackrel{\text{def}}{=} | \, \mathbf{r}_1 \, \rangle \otimes \cdots \otimes | \, \mathbf{r}_N \, \rangle. \tag{2.6.16b}$$

Drugim rečima, uopšteni vektori iz skupa (2.6.16a) obrazuju $\mathcal{U}(\mathcal{H}^{(o)}_{1...N})$. Sam Hilbert-ov prostor $\mathcal{H}^{(o)}_{1...N}$ sastoji se od svih vektora

$$| \, \psi \, \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N) \, | \, \mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N \, \rangle \, \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \cdots \mathrm{d}\mathbf{r}_N \tag{2.6.17a}$$

za koje važi

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r}_1\cdots\mathrm{d}\mathbf{r}_N<\infty. \tag{2.6.17b}$$

2.6.9 Delovanje osnovnog skupa opservabli u $\mathcal{H}^{(o)}_{1\ldots N}$

Operatori $\hat{\mathbf{r}}_1$ i $\hat{\mathbf{p}}_1$ deluju na sledeći način:

$$\hat{\mathbf{r}}_1\mid\psi\,\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\mathbf{r}_1\psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)\mid\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r}_1\cdots\mathrm{d}\mathbf{r}_N \tag{2.6.18}$$

$$\hat{\mathbf{p}}_1\mid\psi\,\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}[-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_1}\psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)]\mid\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r}_1\cdots\mathrm{d}\mathbf{r}_N \tag{2.6.19}$$

(treba imati na umu da su (2.6.18) i (2.6.19) sistemi sa po tri jednakosti, skraćeno napisani). Analogno važi za $\hat{\mathbf{r}}_n,\hat{\mathbf{p}}_n$, $n=2,3,...,N$.

Definicije domena opservabli $\hat{\mathbf{r}}_1,...,\hat{\mathbf{p}}_N$ u $\mathcal{H}^{(o)}_{1\ldots N}$ mogu se dobiti neposrednim uopštenjem odgovarajućih definicija (§ 2.6.5) u slučaju jedne čestice.

2.7 Opšta teorija reprezentovanja

U ovom odeljku ćemo sistematski izložiti kako se sa apstraktnog prostora stanja prelazi na prostor brojnih kolona ili na prostor funkcija. Pri ovom tzv. reprezentovanju operatori postaju matrice, a apstraktne operacije se pojavljuju u vidu običnih množenja matrica. Tako apstraktne entitete zamenjujemo sistemima brojeva i postižemo konkretnu formu kvantne mehanike sa kojom se lako računa.

2.7.1 Ideja reprezentovanja

Poznato je iz linearne algebre da svaki fiksirani bazis u apstraktnom prostoru omogućava izomorfno preslikavanje apstraktnog prostora na prostor brojnih kolona. Pri tome apstraktni vektori i operatori prelaze u, ili kao što se to kaže, reprezentuju se brojnim kolonama odnosno matricama. Isto važi i u beskonačnodimenzionalnom Hilbert-ovom prostoru. Tu je pored bazisa pravih vektora moguće izabrati i bazis uopštenih vektora.

U kvantnoj mehanici se po pravilu polazi od opservabli. Tako se i izbor bazisa u apstraktnom prostoru stanja $\mathcal{H}$ vrši zadavanjem neke *kompletne opservable* $\hat{A}$ i uzimanjem njenog svojstvenog bazisa (uz neku konvenciju za fiksiranje faznih faktora svih vektora bazisa u odnosu na otvoreni fazni faktor jednog od njih).

Kao što smo videli u § 2.4.2, jedna kompletna opservabla $\hat{A}$ može da se zameni kompletnim skupom kompatibilnih opservabli. Onda se uzima zajednički svojstveni bazis i svaki bazisni vektor se određuje odgovarajućim skupom svojstvenih vrednosti ili skupom kvantnih brojeva.

Iako se u realnim problemima kvantne mehanike po pravilu pojavljuju kompletni skupovi opservabli, radi jednostavnosti mi ćemo u ovom odeljku izložiti opštu teoriju reprezentovanja tako što ćemo pretpostaviti da imamo jednu kompletnu opservablu $\hat{A}$ i da ona, preko svog svojstvenog

bazisa, definiše reprezentaciju. Zvaćemo to *$\hat{A}$-reprezentacijom.* U slučaju kompletnog skupa opservabli $\hat{A}_1, ..., \hat{A}_K$ govori se o $\hat{A}_1, ..., \hat{A}_K$-reprezentaciji.

Sad smo izložili šta reprezentovanje znači u formalizmu kvantne mehanike, tj. matematičku ideju reprezentovanja. *Fizička ideja reprezentovanja* je slična fizičkoj ideji izbora koordinatnog sistema. I u klasičnoj fizici i u kvantnoj mehanici fiksira se jedan koordinatni sistem. U klasičnoj fizici to odmah rezultira u brojevima ($\mathbf{r} \stackrel{\text{def}}{=} x, y, z$; $\mathbf{p} \stackrel{\text{def}}{=} p_x, p_y, p_z$ itd.), ali u kvantnoj mehanici još uvek imamo apstraktne vektore $\mid \psi \rangle$, u apstraktnom prostoru stanja $\mathcal{H}$. Stoga moramo fiksirati i "koordinatni sistem" u prostoru stanja $\mathcal{H}$ — a to je bazis u $\mathcal{H}$ — kako bismo najzad došli do brojeva. Opisivanje fizičkih sistema mora se u krajnjoj liniji svesti na jezik brojeva! Fiksiranje "koordinatnog sistema" u $\mathcal{H}$ je potpuno nezavisno od fiksiranja referentnog sistema u običnom prostoru.

2.7.2 Izbor reprezentacije

U (2.3.14) videli smo da se za potrebe kvantne mehanike najopštija kompletna opservabla $\hat{A}$ u spektralnoj formi zadaje kao

$$\hat{A} = \sum_n a_n \mid n \rangle\langle n \mid + \int_p^t \mid s \rangle s \langle s \mid \, \mathrm{d}s. \tag{2.7.1}$$

Drugim rečima, opservabla ima diskretni spektar $\{a_n \mid \forall n\}$ i kontinualni spektar $[p, t]$ i oba spektra su prosta, tj. svaka svojstvena vrednost je nedegenerisana.

Na sreću, za teoriju reprezentovanja u kvantnoj mehanici dovoljni su operatori manje opštosti od (2.7.1). *Ograničićemo se* na kompletne opservable koje imaju ili *čisto diskretan spektar* ili *čisto kontinualan spektar.* Drugim rečima, kompletna opservabla $\hat{A}$ će imati ili spektralnu formu

$$\hat{A} = \sum_n a_n \mid n \rangle\langle n \mid \tag{2.7.2}$$

ili formu

$$\hat{A} = \int_p^t \mid s \rangle s \langle s \mid \, \mathrm{d}s. \tag{2.7.3}$$

Prema tome, *svojstveni bazis* biće ili vida (sa relacijom ortonormiranosti i relacijom zatvorenosti):

$$\{\mid n \rangle \mid \forall n\}, \ \langle\, n \mid n' \rangle = \delta_{nn'}, \ \sum_n \mid n \rangle\langle n \mid = \hat{I} \tag{2.7.4a,b,c}$$

ako se radi o opservabli $\hat{A}$ datoj sa (2.7.2); ili će pak biti oblika (sa analognim relacijama):

$$\{\mid s \rangle \mid p \leq s \leq t\}, \ \langle\, s \mid s' \rangle = \delta(s - s'), \ \int_p^t \mid s \rangle \, \mathrm{d}s \langle s \mid = \hat{I} \tag{2.7.5a,b,c}$$

ako imamo opservablu $\hat{B}$ zadatu sa (2.7.3) (uporediti (2.3.7) i (2.3.9a)).

Napomenimo da se kompletnost bazisa sastoji u tome da se svaki vektor $\mid \psi \rangle \in \mathcal{H}$ može razviti po dotičnom bazisu. U slučaju diskretnog bazisa imamo:

$$\mid \psi \rangle = \hat{I} \mid \psi \rangle = \sum_n \mid n \rangle\langle\, n \mid \psi \rangle = \sum_n \psi_n \mid n \rangle, \tag{2.7.6}$$

a u slučaju kontinualnog bazisa umesto toga imamo:

$$| \psi \rangle = \hat{I} \mid \psi \rangle = \int_p^t \mid s \rangle \, \mathrm{d}s \langle \, s \mid \psi \rangle = \int_p^t \psi(s) \mid s \rangle \, \mathrm{d}s. \tag{2.7.7}$$

Koeficijenti razvoja[2.7.1] (ili Fourier-ovi koeficijenti) su $\psi_n \stackrel{\text{def}}{=} \langle \, n \mid \psi \rangle$ odnosno $\psi(s) \stackrel{\text{def}}{=} \langle \, s \mid \psi \rangle$.

Radi konciznosti, u ovom odeljku ćemo diskretni slučaj nazivati $\hat{D}$-reprezentacijom, a kontinualni $\hat{K}$-reprezentacijom.

Obeležimo sa $\mid \psi \, \rangle$, $\hat{C}$ i $\hat{D}_a$ proizvoljan vektor, proizvoljan (hermitski ili unitarni) linearni operator odnosno proizvoljan (unitarni) antilinearni[2.7.2] operator[2.7.3] u $\mathcal{H}$. Postavlja se pitanje kako ćemo dobiti njihove $\hat{D}$- i $\hat{K}$-reprezentente. Odgovor ćemo dati u sledeća dva paragrafa.

2.7.3 Formule diskretne reprezentacije

Kada je fiksiran bazis (2.7.4a) u $\mathcal{H}$, onda je time definisan jedan izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}$ apstraktnog prostora $\mathcal{H}$ na prostor brojnih kolona. Ovaj izomorfizam zadaje se sledećim preslikavanjem:

$$\forall \mid \psi \, \rangle \in \mathcal{H} \; : \; \hat{\mathcal{J}} \mid \psi \, \rangle = (\psi_n) \; , \boxed{\psi_n = \langle \, n \mid \psi \rangle}, \tag{2.7.8a,b}$$

gde smo sa (ψ_n) obeležili kolonu brojeva ψ_n, $n = 1, 2, ...$

Zadatak 2.7.1 Dokazati da je preslikavanje (2.7.8) izomorfizam.

Prostor prebrojivo beskonačnih brojnih kolona se obeležava simbolom ℓ_2. Skalarni proizvod, koji je isti broj u $\mathcal{H}$ i u ℓ_2, možemo izračunati kako glasi u ℓ_2 polazeći od $\mathcal{H}$: $\langle \, \psi \mid \varphi \rangle = \langle \psi \mid \hat{I} \mid \varphi \, \rangle = \sum_n \langle \, \psi \mid n \rangle \langle \, n \mid \varphi \rangle = \sum_n \psi_n^* \varphi_n$ (naravno, samo poslednji izraz se odnosi na ℓ_2).

Očigledno, kvadrat norme brojne kolone $(\psi_n) \in \ell_2$ glasi $\sum_n |\psi_n|^2$, i usled $\langle \, \psi \mid \psi \rangle < \infty$ imamo $\sum_n |\psi_n|^2 < \infty$. Tako smo dobili definiciju prostora ℓ_2: to je prostor svih kompleksnih prebrojivo beskonačnih brojnih kolona sa konačnom normom: $\sum_n |\psi_n|^2 < \infty$.

Ako je apstraktni prostor konačno dimenzionalan, te u reprezentaciji imamo kolone od konačno mnogo brojeva, onda ćemo ovaj prostor obeležavati sa $\mathbb{C}^N$ (N je dimenzija). U ovom slučaju norma je, naravno, uvek konačna.

[2.7.1] Sa $\mid \psi_n \, \rangle$ ili ψ_n obeležavali smo i vektore stanja. U kontekstu reprezentovanja u bazisu, simbolima ψ_n, φ_n itd. označavaćemo koeficijente razvoja vektora $\mid \psi \, \rangle$, $\mid \varphi \rangle$ itd. u datom bazisu $\{ \mid n \, \rangle \mid \forall n \}$. Očekuje se da čitalac asimilira pojmove a ne puke oznake, za šta je preduslov da se na kontekst uvek obraća pažnja. Sličan je slučaj sa N, na primer, kojim smo označavali dimenziju prostora, broj čestica u sistemu i broj sistema u kvantnom ansamblu. Međutim, sve se to jasno razlikuje po kontekstu.

[2.7.2] Od linearnih operatora u kvantnoj mehanici fizički smisao imaju pored hermitskih samo unitarni, kojima se izražavaju transformacije simetrije kao što ćemo videti u § 5.2. Od antilinearnih operatora $\hat{D}_a$ (indeks podseća na antilinearnost) koristićemo se samo antiunitarnim (tj. antilinearnim unitarnim) operatorima i to će isključivo biti operator vremenske inverzije ili proizvod ovog operatora sa operatorom neke druge transformacije simetrije (uporediti § 5.2 i § 8.2).

[2.7.3] Unitarni (linearni i antilinearni) operatori su svugde definisani kako u $\mathcal{H}$ tako i u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$. Ali hermitski operator $\hat{C}$ može da ne bude svugde definisan (ni u $\mathcal{H}$ ni u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$) kada je spektar od $\hat{C}$ neograničen. Onda da bismo mogli da reprezentujemo $\hat{C}$ u bazisima (2.7.4a) i (2.7.5a), moramo eksplicitno zahtevati da ovi bazisi pripadaju domenu operatora $\hat{C}$ (u $\mathcal{H}$ odnosno u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$).

Izomorfizam (2.7.8) daje $\hat{D}$-reprezentaciju. Svrha reprezentovanja je da sa apstraktnih operatora $\hat{C}$, $\hat{D}_a$ možemo preći na matrice, a da one *ekvivalentno* deluju na brojne kolone kao pomenuti operatori na apstraktne vektore.

Neka je dato delovanje operatora $\hat{C}$ u $\mathcal{H}$:

$$\hat{C} \mid \psi \rangle = \mid \varphi \rangle. \tag{2.7.9}$$

Pomnožimo ovu jednakost skalarno sa $\langle n \mid$ iz bazisa (2.7.4a) (zbog (2.7.8b) to ćemo zvati uzimanjem n-reprezententa) i stavimo $\hat{C} = \hat{C}\hat{I}$. Onda ćemo na osnovu (2.7.4c) dobiti:

$$\sum_{n'} \langle n \mid \hat{C} \mid n' \rangle \langle n' \mid \psi \rangle = \langle n \mid \varphi \rangle, \tag{2.7.10a}$$

(ovde n' prelazi isti skup vrednosti kao n), ili u skraćenoj notaciji:

$$\sum_{n'} C_{nn'} \psi_{n'} = \varphi_n, \tag{2.7.10b}$$

gde su $C_{nn'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle n \mid \hat{C} \mid n' \rangle$. Ako sa $(C_{nn'})$ označimo matricu čiji su matrični elementi $C_{nn'}$, onda (2.7.10b) možemo da prepišemo i u matričnom vidu:

$$(C_{nn'})(\psi_n) = (\varphi_n). \tag{2.7.10c}$$

Zadatak 2.7.2 Dokazati da važi relacija ekvivalentnosti po izomorfizmu $\hat{\mathcal{J}}$, zadatim sa (2.7.8b):

$$(C_{nn'}) = \hat{\mathcal{J}} \hat{C} \hat{\mathcal{J}}^{-1}. \tag{2.7.11}$$

Dakle, (2.7.10c) je matrična reprezentacija od (2.7.9). Treba zapaziti da je samo "delovanje" operatora $\hat{C}$ u (2.7.9) prešlo u obično matrično množenje u (2.7.10c).

Analogno, za antilinearni operator polazimo od

$$\hat{D}_a \mid \psi \rangle = \mid \varphi \rangle \tag{2.7.12}$$

u $\mathcal{H}$ i uzimanjem n-reprezententa i koristeći se zatvorenošću bazisa, dolazimo do

$$\sum_{n'} \langle n \mid \{ \hat{D}_a [\mid n' \rangle \langle n' \mid \psi \rangle] \} = \sum_{n'} \langle n \mid \hat{D}_a \mid n' \rangle \langle n' \mid \psi \rangle^* = \langle n \mid \varphi \rangle, \tag{2.7.13a}$$

ili

$$\sum_{n'} D_{nn'} \psi^*_{n'} = \varphi_n, \tag{2.7.13b}$$

gde su $D_{nn'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle n \mid \hat{D}_a \mid n' \rangle$, tj.

$$(D_{nn'}) K (\psi_n) = (\varphi_n), \tag{2.7.13c}$$

gde je K *operacija kompleksne konjugacije* (svih brojeva u brojnoj koloni na koju deluje).

Zadatak 2.7.3 Objasniti odakle potiče kompleksna konjugacija u (2.7.13a).

Zadatak 2.7.4 Dokazati da važi

$$(D_{nn'})K = \hat{\mathcal{J}}\hat{D}_a\hat{\mathcal{J}}^{-1}. \tag{2.7.14}$$

Dokazali smo sledeći teorem:

Teorem 2.7.1 *U diskretnoj, $\hat{D}$-reprezentaciji proizvoljan hermitski ili unitarni linearni operator $\hat{C}$ i proizvoljan antilinearni unitarni operator $\hat{D}_a$ u apstraktnom Hilbert-ovom prostoru stanja $\mathcal{H}$ predstavljeni su matricom $(C_{nn'})$ odnosno tzv.* antilinearnom matricom $(D_{nn'})K$, *pri čemu matrični elementi glase:*

$$\boxed{C_{nn'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle n \mid \hat{C} \mid n' \rangle}, \quad \boxed{D_{nn'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle n \mid \hat{D}_a \mid n' \rangle}. \tag{2.7.15a,b}$$

Delovanje pomenutih matričnih reprezentenata izražava se formulom (2.7.10b) odnosno (2.7.13b).

Matrica $(D_{nn'})$ naziva se *matričnim faktorom* antilinearne matrice $(D_{nn'})K$.

Zadatak 2.7.5 Pokazati da je hermitski operator $\hat{C}$ reprezentovan hermitskom matricom $(C_{nn'})$, a unitarni operator $\hat{C}$ da je predstavljen unitarnom matricom $(C_{nn'})$.

Zadatak 2.7.6 Pokazati da matrica $(D_{nn'})$ koja predstavlja opservablu $\hat{D}$ (zadatu sa (2.7.2)) u njenoj sopstvenoj reprezentaciji je dijagonalna sa svojstvenim vrednostima na dijagonali:

$$D_{nn'} = d_n\delta_{nn'}. \tag{2.7.16}$$

Zbog (2.7.16) termin "$\hat{D}$-reprezentacija" se često zamenjuje i rečima: reprezentacija u kojoj je opservabla $\hat{D}$ dijagonalna.

2.7.4 Formule kontinualne reprezentacije

U $\hat{K}$-reprezentaciji imamo izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}'$ analogno diskretnom slučaju:

$$\forall \mid \psi \rangle \in \mathcal{H} \; : \; \hat{\mathcal{J}}' \mid \psi \rangle = \psi(s) \; , \boxed{\psi(s) = \langle \; s \mid \psi \rangle}, \tag{2.7.17a}$$

koji preslikava apstraktni prostor $\mathcal{H}$ na prostor $\mathcal{L}^2([p,t])$ po modulu kvadratno integrabilnih funkcija $\psi(s)$, tj. funkcija koje zadovoljavaju $\int_p^t |\psi(s)|^2 \,\mathrm{d}s < \infty$ (uporediti (2.3.2)). $\mathcal{L}^2([p,t])$ je analogon prostora brojnih kolona ℓ_2.

Delovanje proizvoljnog linearnog operatora $\hat{C}$ u $\mathcal{H}$: $\hat{C} \mid \psi \rangle = \mid \varphi \rangle$ u $\mathcal{L}^2([p,t])$ postaje (analogno kao u slučaju diskretne reprezentacije):

$$\boxed{\langle s \mid \hat{C} \mid \psi \rangle = \langle \; s \mid \varphi \rangle \;\Rightarrow\; \int_p^t \langle s \mid \hat{C} \mid s' \rangle \,\mathrm{d}s' \langle \; s' \mid \psi \rangle = \langle \; s \mid \varphi \rangle \;\Rightarrow\; \int_p^t C(s,s')\psi(s')\,\mathrm{d}s' = \varphi(s)}. \tag{2.7.18}$$

gde je tzv. *kernel integralnog operatora* $C(s,s')$ po definiciji

$$\boxed{C(s,s') \stackrel{\text{def}}{=} \langle s \mid \hat{C} \mid s' \rangle} \tag{2.7.19}$$

i on reprezentuje apstraktni operator $\hat{C}$ u prostoru $\mathcal{L}^2([p,t])$.

Na analogan način, apstraktna jednakost $\hat{D}_a \mid \psi \rangle = \mid \varphi \rangle$ postaje

$$\int_p^t D(s,s')\psi^*(s')\,\mathrm{d}s' = \varphi(s), \tag{2.7.20}$$

gde je kernel integralnog operatora dat formulom

$$D(s,s') \stackrel{\text{def}}{=} \langle s \mid \hat{D}_a \mid s' \rangle \tag{2.7.21}$$

Da rezimiramo:

Teorem 2.7.2 *U neprekidnoj $\hat{K}$-reprezentaciji proizvoljan apstraktni linearni operator $\hat{C}$ i proizvoljan apstraktni antilinearni operator $\hat{D}_a$ reprezentuju se kernelom integralnog operatora, koji je funkcija dve promenljive i zadaje se sa (2.7.19) odnosno sa (2.7.21), a čije je delovanje u $\mathcal{L}^2([p,t])$ dato jednakošću (2.7.18) odnosno (2.7.20).*

Što se tiče skalarnog proizvoda i norme vektora u $\mathcal{L}^2([p,t])$ imamo opet analogiju sa ℓ_2 (samo što se red zamenjuje integralom):

$$\langle\, \psi \mid \varphi\rangle = \langle \psi \mid \hat{I} \mid \varphi \rangle = \int_p^t \langle\, \psi \mid s\rangle\,\mathrm{d}s \langle\, s \mid \varphi\rangle = \int_p^t \psi^*(s)\varphi(s)\,\mathrm{d}s, \tag{2.7.22}$$

$$\langle\, \psi \mid \psi\rangle = \int_p^t \|\psi(s)\|^2\,\mathrm{d}s. \tag{2.7.23}$$

Možda nije suvišno napomenuti da je samo postojanje fazne konvencije (bez obzira na njen oblik) koja za ceo svojstveni bazis (opservable $\hat{K}$ ili $\hat{D}$) ostavlja samo jedan fazni faktor proizvoljan, *neophodno* da bi reprezentacija zavisila samo od opservable ($\hat{K}$ ili $\hat{D}$).

2.7.5 Srednje vrednosti u reprezentaciji

Osnovni način kako u kvantnoj mehanici dolazimo do brojeva sastoji se u uzimanju tzv. matričnih elemenata hermitskih operatora: ako su $\mid \psi \rangle$ i $\mid \varphi \rangle$ dva vektora stanja a $\hat{C}$ opservabla, onda je $\langle \psi \mid \hat{C} \mid \varphi \rangle$ matrični element. Najvažniji matrični element je očekivana vrednost $\langle \psi \mid \hat{C} \mid \psi \rangle$. Postavlja se pitanje kako se ovi brojevi izračunavaju u diskretnoj $\hat{D}$-reprezentaciji i u kontinualnoj $\hat{K}$-reprezentaciji.

Da bismo iz apstraktnog prostora $\mathcal{H}$ prešli u prostor brojnih kolona ℓ_2 ili $\mathbb{C}^N$ $\hat{D}$-reprezentacije, opet ćemo se poslužiti zatvorenošću bazisa (2.7.4c):

$$\langle \psi \mid \hat{C} \mid \varphi \rangle = \langle \psi \mid \hat{I}\hat{C}\hat{I} \mid \varphi \rangle = \sum_{nn'} \langle\, \psi \mid n\rangle\langle n \mid \hat{C} \mid n' \rangle \langle\, n' \mid \varphi\rangle = \sum_{nn'} \psi_n^* C_{nn'}\varphi_{n'}. \tag{2.7.24}$$

Obratiti pažnju na to da u (2.7.24) brojna kolona $(\sum_{n'} C_{nn'}\varphi_{n'})$ je $\hat{D}$-reprezentent vektora $\hat{C} \mid \varphi\rangle$, a dobija se množenjem $N \times N$ matrice $(C_{nn'})$ sa $N \times 1$ matricom (φ_n), gde je N dimenzija od $\mathcal{H}$ ($N = \aleph_0$ u ℓ_2). Sledeći korak u (2.7.24) je izračunavanje skalarnog proizvoda u ℓ_2 ili u $\mathbb{C}^N$. Naime, $\langle\, \psi \mid \chi\rangle$ (u našem slučaju $\mid \chi \rangle = \hat{C} \mid \psi \rangle$) se u ovom prostoru dobija množenjem $1 \times N$ matrice $(\psi_n)^\dagger$ sa $N \times 1$ matricom $(\chi_n) : \sum_n \psi_n^* \chi_n$. Adjungovanje, koje se sastoji od transponovanja i

kompleksnog konjugovanja, pretvara brojnu kolonu u brojnu vrstu sa konjugovanim matričnim elementima.

Srednja vrednost opservable $\hat{C}$ u stanju $|\,\psi\,\rangle$ u $\hat{D}$-reprezentaciji glasi

$$\langle\psi\mid\hat{C}\mid\psi\,\rangle=\sum_{nn'}\psi_n^*C_{nn'}\psi_{n'},\tag{2.7.25}$$

kao što odmah sledi iz (2.7.24).

U specijalnom slučaju $\hat{C}=\hat{D}$, imamo $C_{nn'}=D_{nn'}=\delta_{nn'}d_n$ i

$$\langle\psi\mid\hat{D}\mid\psi\,\rangle=\sum_n d_n|\psi_n|^2.\tag{2.7.26}$$

Pošto je $|\psi_n|^2=\langle\,\psi\mid n\rangle\langle\,n\mid\psi\rangle$, $|\psi_n|^2=v(d_n,\hat{D},\psi)\stackrel{\text{def}}{=}v(d_n)$ (uporediti (2.1.8),(2.1.9)) u (2.7.26) prepoznajemo opštu statističku preskripciju za izračunavanje srednje vrednosti: usrednjeni zbir pojedinih mogućih mernih rezultata, pri čemu su verovatnoće $v(d_n)$ statističke težine usrednjavanja (uporediti (1.4.6b)).

Analogno, pomoću uslova kompletnosti (2.7.5c) u neprekidnoj $\hat{K}$-reprezentaciji dobijamo sledeće formule:

$$\langle\psi\mid\hat{C}\mid\varphi\,\rangle=\int_p^t\int_p^t\psi^*(s)C(s,s')\varphi(s')\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}s';\tag{2.7.27}$$

za očekivanu vrednost od $\hat{C}$ u $|\,\psi\,\rangle$:

$$\langle\psi\mid\hat{C}\mid\psi\,\rangle=\int_p^t\int_p^t\psi^*(s)C(s,s')\psi(s')\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}s';\tag{2.7.28}$$

najzad, za srednju vrednost od $\hat{K}$ u sopstvenoj reprezentaciji:

$$\langle\psi\mid\hat{K}\mid\psi\,\rangle=\int_p^t s|\psi(s)|^2\,\mathrm{d}s.\tag{2.7.29}$$

Treba zapaziti da smo došli do (2.7.29) zamenom $C(s,s')=K(s,s')=s\delta(s-s')$ u (2.7.28), a Dirac-ova delta funkcija $\delta(s-s')$ daje

$$\int_p^t s\psi^*(s)\delta(s-s')\psi(s')\,\mathrm{d}s'=s|\psi(s)|^2,$$

jer po definiciji (to je distribucija koja) izbacuje podintegralnu funkciju (po s') sa fiksiranom vrednošću $s'=s$.

2.7.6 Svojstveni problem u reprezentaciji

Osnovni računski problem koji se rešava u kvantnoj mehanici je *svojstveni problem* neke opservable $\hat{C}$. Postavlja se pitanje kako se to formuliše u $\hat{D}$- i $\hat{K}$-reprezentaciji.

Projektovanje odgovarajuće komponente i relacija zatvorenosti daju u $\hat{D}$-reprezentaciji:

$$\hat{C}\mid\varphi^{(k)}\rangle=c_k\mid\varphi^{(k)}\rangle\;\Rightarrow\sum_{n'}\langle n\mid\hat{C}\mid n'\rangle\langle\,n'\mid\varphi^{(k)}\rangle=c_k\langle\,n\mid\varphi^{(k)}\rangle\Rightarrow\sum_{n'}C_{nn'}\varphi_{n'}^{(k)}=c_k\varphi_n^{(k)}\tag{2.7.30}$$

(ovde je n fiksirani, a n' nemi kvantni broj $\hat{D}$-reprezentacije; k je kvantni broj opservable $\hat{C}$).

Analogno, isti svojstveni problem u $\hat{K}$-reprezentaciji glasi

$$\int_p^t C(s,s')\varphi^{(k)}(s')\,\mathrm{d}s' = c_k\varphi^{(k)}(s). \tag{2.7.31}$$

2.7.7 Transformaciona teorija diskretnih reprezentacija

Nameće se sledeće pitanje. Pošto se sa istog apstraktnog prostora stanja $\mathcal{H}$ može preći na toliko reprezentacija koliko ima bazisa u $\mathcal{H}$, da li postoji prosta preskripcija kako preći sa jedne reprezentacije na drugu (bez prolaženja kroz $\mathcal{H}$).

Pretpostavimo da pored $\hat{D}$ imamo još jednu opservablu $\hat{D}'$ takođe sa čcisto diskretnim i prostim spektrom. Želimo *preći sa $\hat{D}$-reprezentacije na $\hat{D}'$-reprezentaciju.*

Svojstvene vektore $\mid n'\,\rangle = \mid \varphi^{(n')}\,\rangle$ od $\hat{D}'$ prebrojavaćemo kvantnim brojem n' (sada ćemo po primu prepoznavati opservablu $\hat{D}'$ i entitete vezane za nju). Apstraktni vektor $\mid \psi\,\rangle$ predstavljen je u $\hat{D}'$-reprezentaciji brojnom kolonom $(\psi_{n'})$.

Što se tiče predstavnika vektora, možemo pisati

$$\psi_{n'} = \langle\, \varphi^{(n')} \mid \psi\rangle = \sum_n \langle\, \varphi^{(n')} \mid n\rangle\langle\, n \mid \psi\rangle = \sum_n \varphi_n^{(n')^*}\psi_n. \tag{2.7.32}$$

Dakle, sa komponenti ψ_n u $\hat{D}$-reprezentaciji lako ćemo preći na komponente $\psi_{n'}$ u $\hat{D}'$-reprezentaciji ako raspolažemo svojstvenim vektorima opservable $\hat{D}'$ u $\hat{D}$-reprezentaciji, tj. ako znamo brojne kolone $(\varphi_n^{(n')})$ svih svojstvenih vektora $\mid \varphi^{(n')}\,\rangle$ od $\hat{D}'$.

Zadatak 2.7.7 Može li se (2.7.32) izvesti u drugom obliku?

Matrični predstavnik linearnog operatora $\hat{C}$ se transformiše na sledeći način: $C_{m'n'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle\varphi^{(m')} \mid \hat{C} \mid \varphi^{(n')}\,\rangle = \sum_{m,n}\langle\, \varphi^{(m')} \mid m\rangle\langle m \mid \hat{C} \mid n\,\rangle\langle\, n \mid \varphi^{(n')}\rangle$. Prema tome,

$$C_{m'n'} = \sum_{m,n} \varphi_m^{(m')^*} C_{mn}\varphi_n^{(n')} \tag{2.7.33}$$

(ovde su m' i n' fiksirane vrednosti kvantnog broja za $\hat{D}'$, a m i n su nemi kvantni brojevi za $\hat{D}$). Opet su nam potrebne samo brojne kolone $(\varphi_n^{(n')})$ svih svojstvenih vektora $\mid \varphi^{(n')}\,\rangle$.

Zadatak 2.7.8 Izvesti (2.7.33) pomoću svojstvenih vektora opservable $\hat{D}$ u $\hat{D}'$-reprezentaciji.

Što se tiče antilinearnih operatora $\hat{D}_a$, imamo

$$D_{m'n'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle\varphi^{(m')} \mid \hat{D}_a \mid \varphi^{(n')}\,\rangle = \sum_{m,n} \varphi_m^{(m')^*} D_{mn}\varphi_n^{(n')^*} \tag{2.7.34}$$

($\hat{D}_a$, pošto je antilinearan, konjuguje sve brojeve koji stoje desno od njega!).

Dakle, formula (2.7.34) zadaje preskripciju kojom se sa matričnih elemenata matričnog faktora antilinearne matrice $(D_{m'n'})K$ (koja predstavlja $\hat{D}_a$ u $\hat{D}$-reprezentaciji) prelazi na matrične elemente matričnog faktora antilinearne matrice $(D_{m'n'}K)$ (koja reprezentuje $\hat{D}_a$ u $\hat{D}'$-reprezentaciji).

Treba zapaziti da je operacija kompleksne konjugacije K *jedna jedinstvena* ne samo za sve antilinearne operatore $\hat{D}_a$ u jednoj reprezentaciji, nego i za sve reprezentacije.

Pažljivi čitalac je, bez sumnje, zapazio da pri prelasku sa jedne poznate $\hat{D}$-reprezentacije na drugu nepoznatu $\hat{D}'$-reprezentaciju *uvek polazimo od nepoznatih veličina* ($\psi_{n'}$ u (2.7.32), $C_{m'n'}$ u (2.7.33) ili $D_{m'n'}$ u (2.7.34)), pa ih onda, ubacivanjem razlaganja jedinice po bazisu poznate $\hat{D}$-reprezentacije, tj. $\hat{I} = \sum_n \mid n\rangle\langle n \mid$, svodimo na poznate veličine. (Nikako ne treba poći od poznatih veličina i zalutati...)

Formule preračunavanja reprezentenata od $\mid \psi\rangle$, $\hat{C}$ i $\hat{D}_a$ iz jedne u drugu reprezentaciju, zajedno sa viđenjem tih formula iz apstraktnog prostora $\mathcal{H}$, naziva se *transformacionom teorijom* kvantne mehanike.

2.7.8 Veza sa matematikom

Uspostavimo sad vezu između transformacione teorije kvantne mehanike i formula transformacija koje su standardne u linearnoj algebri i u teoriji Hilbert-ovih prostora. Učinićemo to preko zadataka koje čitalac treba sam da reši.

Zadatak 2.7.9 Neka je matrica $S \stackrel{\text{def}}{=} (S_{n'n})$ matrica razvijanja novog bazisa $\{\mid \varphi^{(n')}\rangle \mid \forall n'\}$ po vektorima starog bazisa $\{\mid n\rangle \mid \forall n\}$, tj.

$$\mid \varphi^{(n')}\rangle = \sum_n S_{n'n} \mid n\rangle,\ \forall n'. \tag{2.7.35}$$

Pokazati da, uz oznake $C_{\hat{D}'} \stackrel{\text{def}}{=} (C_{m'n'})$, $C_{\hat{D}} \stackrel{\text{def}}{=} (C_{mn})$, transformaciona relacija (2.7.33) može da se prepiše u vidu matrične relacije:

$$C_{\hat{D}'} = S^{-1^T} C_{\hat{D}} (S^{-1^T})^{-1} \tag{2.7.36}$$

("T" označava transponovanje), tj., kao što se kaže, reprezentent $C_{\hat{D}}$ transformacijom sličnosti sa matricom kontragredijentnom od S (to je S^{-1^T}) prelazi u reprezentent $C_{\hat{D}'}$.

Zadatak 2.7.10 Pokazati da za antilinearni operator $\hat{D}_a$ matrična transformacija kojom se prelazi sa matričnog faktora $D_{\hat{D}} \stackrel{\text{def}}{=} (D_{mn})$ na matrični faktor $D_{\hat{D}} \stackrel{\text{def}}{=} (D_{m'n'})$ glasi:

$$D_{\hat{D}'} = S^{-1^T} D_{\hat{D}} (S^{-1^T})^T. \tag{2.7.37}$$

Matrični faktor $D_{\hat{D}}$ antilinearne matrice $D_{\hat{D}}K$ prelazi u matrični faktor $D_{\hat{D}'}$ antilinearne matrice $D_{\hat{D}'}K$ tzv. transformacijom kongruencije matricom S^{-1^T}.

2.7.9 Transformaciona teorija sa kontinualnom reprezentacijom

Čitalac će se, verovatno, bez teškoća moći ubediti da pri prelasku sa diskretne $\hat{D}$-reprezentacije na neprekidnu $\hat{K}$-reprezentaciju imamo sledeće formule:

$$\psi(s) = \sum_n \varphi_n^{(s)^*} \psi_n, \tag{2.7.38a}$$

$$C(s,s') = \sum_{m,n} \varphi_m^{(s)^*} C_{mn} \varphi_n^{(s')}, \tag{2.7.38b}$$

$$D(s,s') = \sum_{m,n} \varphi_m^{(s)^*} D_{mn} \varphi_n^{(s')^*}, \tag{2.7.38c}$$

gde je $(\varphi_n^{(s)})$ brojna kolona koja u $\hat{D}$-reprezentaciji predstavlja uopšteni svojstveni vektor $|\,\varphi^{(s)}\,\rangle$ od $\hat{K}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti s.

Pri obratnom prelasku sa kontinualne $\hat{K}$-reprezentacije na diskretnu $\hat{D}$-reprezentaciju transformacione formule glase (uz oznaku $|\,\chi^{(n)}\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\,n\,\rangle$):

$$\psi_n = \int_p^t \chi^{(n)^*}(s)\psi(s)\,\mathrm{d}s, \tag{2.7.39a}$$

$$C_{mn} = \int_p^t \int_p^t \chi^{(m)^*}(s)C(s,s')\chi^{(n)}(s')\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}s', \tag{2.7.39b}$$

$$D_{mn} = \int_p^t \int_p^t \chi^{(m)^*}(s)D(s,s')\chi^{(n)^*}(s')\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}s'. \tag{2.7.39c}$$

Neka je $\hat{K}'$ druga opservabla sa čisto kontinualnim i prostim spektrom (znakom $'$ ćemo razlikovati sve entitete vezane za $\hat{K}'$ od entiteta koji su u vezi sa $\hat{K}$). Sa $\hat{K}$-reprezentacije na $\hat{K}'$-reprezentaciju prelazi se formulama (obeležavajući $|\,\varphi^{(s')}\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\,s'\,\rangle$):

$$\psi(s') = \int_p^t \chi^{(n)^*}(s)\psi(s)\,\mathrm{d}s, \tag{2.7.40a}$$

$$C(s_1',s_2') = \int_p^t \int_p^t \varphi^{(s_1')^*}(s_1)C(s_1,s_2)\varphi^{(s_2')}(s_2)\,\mathrm{d}s_1\,\mathrm{d}s_2, \tag{2.7.40b}$$

$$D(s_1',s_2') = \int_p^t \int_p^t \varphi^{(s_1')^*}(s_1)C(s_1,s_2)\varphi^{(s_2')^*}(s_2)\,\mathrm{d}s_1\,\mathrm{d}s_2. \tag{2.7.40c}$$

2.8 Koordinatna reprezentacija

U ovom odeljku ćemo ukratko izložiti kako rezultati opšte teorije reprezentovanja poprimaju konkretnu formu u specijalnom slučaju najvažnije, tzv. koordinatne reprezentacije. Poći ćemo od jednodimenzionalne čestice, pa ćemo opet kraticom direktnog proizvoda (ovog puta prostora funkcija) stići do realne, trodimenzonalne čestice i do sistema od N čestica.

2.8.1 Koordinatna reprezentacija 1D čestice

Sada ćemo primeniti opštu teoriju kontinualne $\hat{K}$-reprezentacije iz prethodnog odeljka na slučaj:

$$\hat{K} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{x} \text{ u } \mathcal{H}_x. \tag{2.8.1}$$

Ova reprezentacija se naziva *koordinatnom reprezentacijom* u $\mathcal{H}_x$. Tekuću svojstvenu vrednost s iz opšte teorije pisaćemo sad kao x.

Iz jednakosti (2.5.19a), koja glasi $|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\,|\,x'\,\rangle\,\mathrm{d}x'$, sledi

$$\langle\, x \mid \psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\langle\, x \mid x'\rangle\,\mathrm{d}x' = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\delta(x-x')\,\mathrm{d}x' = \psi(x), \tag{2.8.2}$$

(notacija je već bila prilagođena opštem označavanju $\psi(s) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, s \mid \psi\rangle$).

Dakle, sada sa $\mathcal{H}_x$ prelazimo na prostor svih po modulu kvadratno integrabilnih funkcija $\psi(x)$ (uporediti (2.5.19b)), koji se obeležava sa $\mathcal{L}^2(x)$ (skraćeno od $\mathcal{L}^2(-\infty < x < \infty)$).

Kompleksna funkcija $\psi(x)$ naziva se i *amplitudom verovatnoće*, jer po Postulatu o verovatnoći za slučaj kontinualnog spektra, $\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \langle\, \psi \mid x\rangle\langle\, x \mid \psi\rangle$ je gustina verovatnoće nalaženja čestice u infinitezimalnom intervalu oko tačke x (uporediti ispod (2.3.18)).

Skalarni proizvod u $\mathcal{L}^2(x)$ glasi:

$$\langle\, \psi \mid \varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle\, \psi \mid x\rangle\,\mathrm{d}x\langle\, x \mid \varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\varphi(x)\,\mathrm{d}x. \tag{2.8.3}$$

Proizvoljnu opservablu $\hat{C}$ u $\mathcal{H}_x$ u koordinatnoj reprezentaciji predstavlja kernel integralnog operatora

$$C(x,x') \stackrel{\text{def}}{=} \langle x \mid \hat{C} \mid x'\,\rangle \tag{2.8.4}$$

(uporediti (2.7.19)). Postavlja se pitanje da li se opservable $\hat{x}$, $\hat{p}_x$, koje čine osnovni skup u $\mathcal{H}$, mogu reprezentovati nekim konkretnijim i jednostavnijim izrazom nego što je (2.8.4).

2.8.2 Koordinata i impuls u koordinatnoj reprezentaciji

Teorem 2.8.1 *Operator $\hat{x}$ iz $\mathcal{H}_x$ se u prostoru $\mathcal{L}^2(x)$ koordinatne reprezentacije predstavlja multiplikativnim operatorom:*

$$\hat{x}\mid\psi\,\rangle \;\rightarrow\; \boxed{x\psi(x)}, \tag{2.8.5}$$

a domen čine sve funkcije $\psi(x) \in \mathcal{L}^2(x)$ za koje važi

$$\int_{-\infty}^{\infty}|x\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x < \infty. \tag{2.8.6}$$

Treba uočiti da se u (2.8.5) množi brojem, ali ne konstantnim, već uvek jednakim vrednosti argumenta od $\psi(x)$.

Dokaz: Za $\hat{C} = \hat{x}$ formula (2.8.4) daje $C(x,x') = x\delta(x-x')$, tako da se delovanje kernela integralnog operatora svodi na: $\int_{-\infty}^{\infty}C(x,x')\psi(x')\,\mathrm{d}x' = x\psi(x)$. Definicija domena odmah sledi iz (2.5.20b). *Q. E. D.*

Teorem 2.8.2 *Operator $\hat{p}_x$ iz $\mathcal{H}_x$ se u koordinatnoj reprezentaciji predstavlja diferencijalnim operatorom:*

$$\hat{p}_x\mid\psi\,\rangle \;\rightarrow\; \boxed{-\imath\hbar\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)}, \tag{2.8.7}$$

a domen se sastoji od svih na celoj realnoj osi diferencijabilnih funkcija $\psi(x) \in \mathcal{L}^2(x)$ za koje važi

$$\int_{-\infty}^{\infty}|-\imath\hbar\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x < \infty. \tag{2.8.8}$$

Dokaz: Za $\hat{C} = \hat{p}_x$ treba da izračunamo $C(x,x') = \langle x \mid \hat{p} \mid x' \rangle$. Poći ćemo od delovanja $\hat{p}_x$ u $\mathcal{H}_x$ (datog u (2.5.24*a*)): $\hat{p}_x \mid \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty}(-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}\psi(x')) \mid x' \rangle \mathrm{d}x'$. Množeći sleva skalarno sa $\langle x \mid$ i koristeći se relacijom zatvorenosti $\int_{-\infty}^{\infty} \mid x \rangle \mathrm{d}x \langle x \mid = \hat{I}$ na LS-i, dolazimo do jednakosti

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle x \mid \hat{p}_x \mid x' \rangle \langle x' \mid \psi \rangle \, \mathrm{d}x' = \int_{-\infty}^{\infty} (-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}\psi(x'))\delta(x-x') \, \mathrm{d}x' \tag{2.8.9}$$

(obratiti pažnju na činjenicu da je izraz u zagradi funkcija od x', a za fiksirano x' je broj), što se svodi na

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle x \mid \hat{p}_x \mid x' \rangle \psi(x') \, \mathrm{d}x' = -\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x). \tag{2.8.10}$$

Definicija domena neposredno sledi iz (2.5.24*b*). *Q. E. D.*

2.8.3 Talasna mehanika

Iz istorijskih razloga vektor stanja u koordinatnoj reprezentaciji, tj. $\psi(x) \in \mathcal{L}^2(x)$, naziva se i *talasnom funkcijom* čestice. Kao i u svakoj drugoj reprezentaciji, i u koordinatnoj može se dati sav kvantno-mehanički opis čestice, tj. apstraktni prostor stanja $\mathcal{H}_x$ nije uopšte važan. Kvantna mehanika formulisana u koordinatnoj reprezentaciji naziva se *talasnom mehanikom.*

Istorijski se talasna mehanika (vezana za ime Erwina Schrödinger-a) pojavila pre Dirac-ove apstraktne ili invarijantne kvantne mehanike (misli se na "invarijantnost" u odnosu na izbor reprezentacije). U našem deduktivnom izlaganju kvantne mehanike pošli smo od apstraktnog prostora stanja. Mada je teorija ovako u prvi mah malo teže intuitivno prihvatljiva, ona ima prednost što se u njoj lako sagledava činjenica da sve reprezentacije daju iste rezultate (tj. brojeve) i ekvivalentne forme teorije.

Kao što smo istakli u § 2.7.1, uloga izbora reprezentacije analogna je ulozi izbora koordinatnog sistema u običnom prostor-vremenu. U stvari, u kvantnoj mehanici, kao i u klasičnoj mehanici, fiksiramo jedan koordinatni sistem u prostor-vremenu, ali osim toga i nezavisno od toga možemo da fiksiramo i jedan bazis u prostoru stanja (kao svojstveni bazis opservable koja definiše reprezentaciju). Vredno je zapaziti da, dok je fiksiranje bazisa u prostor-vremenu nužno, izbor bazisa u prostoru stanja nije uvek neophodan (kao što smo videli od § 2.1 do § 2.6).

2.8.4 Trodimenzionalna čestica

Kao što smo u paragrafima § 2.8.1 i § 2.8.2 razradili koordinatnu reprezentaciju za jednodimenzionalnu česticu, analogno tome bismo mogli da razradimo i koordinatnu reprezentaciju za realnu trodimenzionalnu česticu u $\mathcal{H}_o$. Po definiciji, ovde bismo opservablu $\hat{K}$ iz opšte teorije morali zameniti sa *kompletnim skupom kompatibilnih opservabli*: $\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{r}}$. Zbog toga koordinatnu reprezentaciju realne čestice nazivamo i radijus-vektorskom reprezentacijom.

Zajednički svojstveni bazis vektorske opservable $\hat{\mathbf{r}}$ u $\mathcal{H}_o$, kao što znamo, glasi:

$$\{\mid \mathbf{r} \rangle \mid -\infty < q < \infty, \; q = x, y, z\}, \quad \mid \mathbf{r} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} e^{-\frac{\imath}{\hbar}\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}} \mid \mathbf{r} = 0 \rangle. \tag{2.8.11}$$

Ispostavlja se da je svejedno da li prvo odredimo $\mathcal{H}_o$ kao $\mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$ (kao što smo uradili u § 2.6), pa onda pređemo na koordinatnu reprezentaciju iz $\mathcal{H}_o$, ili prvo iz svakog od pomenutih faktor prostora pređemo na koordinatnu reprezentaciju $\mathcal{L}^2(x)$, odnosno $\mathcal{L}^2(y)$, odnosno $\mathcal{L}^2(z)$, a onda formiramo direktni proizvod $\mathcal{L}^2(x) \otimes \mathcal{L}^2(y) \otimes \mathcal{L}^2(z) = \mathcal{L}^2(\mathbf{r})$.

2.8.5 Direktni proizvod talasnih funkcija

Da podsetimo na jedan stav koji se dokazuje u funkcionalnoj analizi i naziva *Fubini-jevim teoremom.*

Stav 2.8.1 *Neka su $\mathcal{L}^2(q)$, $q = x, y, z$ Hilbert-ovi prostori funkcija $\psi(q)$ kvadratno integrabilnih modula, a $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ Hilbert-ov prostor svih funkcija $\psi(\mathbf{r})$ za koje je $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(\mathbf{r})|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r} < \infty$. Onda važi:*

$$\mathcal{L}^2(\mathbf{r}) = \mathcal{L}^2(x) \otimes \mathcal{L}^2(y) \otimes \mathcal{L}^2(z) \tag{2.8.12}$$

pri čemu se za svaki izbor $\psi(x) \in \mathcal{L}^2(x)$, $\varphi(y) \in \mathcal{L}^2(y)$, $\chi(z) \in \mathcal{L}^2(z)$ nekorelisani vektor $\psi(x) \otimes \varphi(y) \otimes \chi(z)$ dobija običnim množenjem funkcija, tj.

$$\psi(x) \otimes \varphi(y) \otimes \chi(z) \stackrel{\text{def}}{=} \psi(x)\varphi(y)\chi(z). \tag{2.8.13}$$

U pogledu značenja (2.8.12) videti matematički podsetnik u § 2.6.3.

2.8.6 Koordinatna reprezentacija za 3D česticu

Nabrojaćemo osnovne rezultate koji se dobijaju pri prelasku na koordinatnu reprezentaciju u $\mathcal{H}_o$.

Sa apstraktnih vektora stanja $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}_o$ prelazimo na talasne funkcije $\psi(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\,\mathbf{r}\mid\psi\rangle$, čije se vrednosti pojavljuju kao koeficijenti razvoja $|\,\psi\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(\mathbf{r})\,|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r}$. Tako se na osnovu bazisa (2.8.11) uspostavlja izomorfizam između $\mathcal{H}_o$ i $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$.

Talasna funkcija $\psi(\mathbf{r})$ naziva se i *amplitudom verovatnoće*, a $|\psi(r)|^2 = \langle\,\psi\mid\mathbf{r}\rangle\langle\,\mathbf{r}\mid\psi\rangle$ je *gustina verovatnoće* nalaženja čestice oko položaja $\mathbf{r}$, tj. $|\psi(\mathbf{r})|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r}$ je verovatnoća da pri simultanom merenju opservabli $\hat{\mathbf{r}}$ dobijemo rezultat iz infinitezimalnog intervala oko $\mathbf{r}$.

Skalarni proizvod u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ glasi;

$$\langle\,\psi\mid\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r}. \tag{2.8.14}$$

Vektorska opservabla $\mathbf{r}$ u $\mathcal{H}_o$ reprezentuje se u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ multiplikativnim vektorskim operatorom:

$$\hat{\mathbf{r}}\,|\,\psi\,\rangle \;\to\; \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}), \tag{2.8.15}$$

a domen je skup svih $\psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ za koje važi $\int_{-\infty}^{\infty}|q\psi(\mathbf{r})|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r} < \infty$, $q = x, y, z$.

Vektorska opservabla $\hat{\mathbf{p}}$ u $\mathcal{H}_o$ predstavlja se u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ diferencijalnim operatorom:

$$\hat{\mathbf{p}}\,|\,\psi\,\rangle \;\to\; -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}), \tag{2.8.16}$$

a domen je skup svih duž ose q diferencijabilnih funkcija iz $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ (tj. $\int_{-\infty}^{\infty}|-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial q}\psi(\mathbf{r})|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r} < \infty$, $q = x, y, z$).

2.8.7 Koordinatna reprezentacija za sistem od N čestica

U slučaju sistema od N čestica, orbitni prostor je $\mathcal{H}^{(o)}_{1...N}$ (kao što smo videli u § 2.6.8), a koordinatnu ili radijus-vektorsku reprezentaciju definiše kompletni skup kompatibilnih vektorskih opservabli

$$\hat{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \hat{\mathbf{r}}_N, \tag{2.8.17}$$

čiji zajednički svojstveni bazis glasi:

$$\{|\, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N \,\rangle \mid \forall \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\}, \tag{2.8.18a}$$

$$|\, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N \,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} e^{-\frac{\imath}{\hbar}\sum_{n=1}^{N} \mathbf{r}_n \cdot \hat{\mathbf{p}}_n} \,|\, \mathbf{r}_1 = 0, \dots, \mathbf{r}_N = 0 \,\rangle. \tag{2.8.18b}$$

Prelazi se na $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, Hilbert-ov prostor svih po modulu kvadratno integrabilnih funkcija $\psi(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N)$. Važi

$$\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1) \otimes \cdots \otimes \mathcal{L}^2(\mathbf{r}_N), \tag{2.8.19}$$

gde se direktno množenje opet realizuje običnim množenjem, kao u gornjem Teoremu Fubinija.

Ostale osnovne rezultate čitalac može sam da ispiše na osnovu rezultata iz paragrafa § 2.8.6.

Zadatak 2.8.1 Reformulisati sve do sada naučene Postulate kvantne mehanike u koordinatnoj reprezentaciji.

2.9 Impulsna i energetska reprezentacija

Ovaj odeljak je posvećen kratkom izlaganju osnovnih crta impulsne reprezentacije za jednodimenzionalnu i za trodimenzionalnu česticu. Definiše se i pojam energetske reprezentacije.

2.9.1 Skoro simetrična uloga impulsa i koordinate

Pođimo od jednodimenzionalne čestice duž x-ose i obratimo još jedanput pažnju na osnovni skup opservabli $\hat{x}, \hat{p}_x$ u $\mathcal{H}_x$.

Kao što je poznato, komutator menja predznak pri uzajamnoj zameni dva operatora u komutatoru. Prema tome, osnovna komutaciona relacija $[\,\hat{x}, \hat{p}_x\,] = \imath\hbar$ može da se prepiše kao

$$[\,\hat{p}_x, \hat{x}\,] = -\imath\hbar. \tag{2.9.1}$$

Pošto smo svu teoriju opservable $\hat{x}$ u $\mathcal{H}_x$ izveli samo iz komutacione relacije $[\,\hat{x}, \hat{p}_x\,] = \imath\hbar$, možemo iz (2.9.1) zaključiti da *$\hat{p}_x$ i $\hat{x}$ igraju potpuno simetrične uloge u $\mathcal{H}_x$ s tačnošću do zamene $\imath$ sa $-\imath$ gde god se $\imath$ pojavljuje.*

Na osnovu ovog zapažanja sve što smo izveli za koordinatu možemo da prepišemo za impuls (uz pomenutu zamenu). Zapažanje bazira na činjenici da smo mogli od početka da uzajamno zamenimo uloge $\hat{p}_x$ i $\hat{x}$ i da pođemo od $\hat{p}_x$ kao kompletne opservable čiji kontinualni spektar nije prazan skup.

2.9.2 Impulsna reprezentacija u $\mathcal{H}_x$

Nabrojaćemo osnovne zaključke za impuls u $\mathcal{H}_x$.

Operator $\hat{p}_x$ je kompletna opservabla u $\mathcal{H}_x$ sa celom realnom osom kao svojim čisto kontinualnim i prostim spektrom. Svojstveni bazis za opservablu $\hat{p}_x$, koji se sastoji od samih uopštenih vektora, glasi:

$$\{|\, p_x \rangle \mid -\infty < p_x < \infty\}, \quad |\, p_x \rangle \stackrel{\text{def}}{=} e^{\frac{\imath}{\hbar} p_x \hat{x}} \,|\, p_x = 0 \,\rangle \tag{2.9.2a,b}$$

(zamenili smo $\imath$ sa $-\imath$).

Impulsnu reprezentaciju u $\mathcal{H}_x$ definiše $\hat{p}_x$. Za nju važi sve što smo izveli za kontinualnu $\hat{K}$-reprezentaciju u odeljku § 2.7, s tim što s zamenjujemo sa p_x, a prostor reprezentacije označavamo sa $\mathcal{L}^2(p_x)$. Vektor $|\, \psi \,\rangle \in \mathcal{H}_x$ se reprezentuje sa $\psi(p_x) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, p_x \mid \psi \rangle$, a $|\psi(p_x)|^2 = \rho(p_x)$ je gustina verovatnoće dobijanja vrednosti oko p_x pri merenju impulsa.

Što se tiče samog osnovnog skupa opservabli $\hat{p}_x, \hat{x}$ u $\mathcal{H}_x$, tu se reprezententi u $\mathcal{L}^2(p_x)$ pojednostavljuju u odnosu na opštu teoriju.

Opservabla $\hat{p}_x$ se u $\mathcal{L}^2(p_x)$ reprezentuje multiplikativnim operatorom:

$$\hat{p}_x \,|\, \psi \,\rangle \;\to\; p_x \psi(p_x), \tag{2.9.3}$$

a opservabla $\hat{x}$ diferencijalnim operatorom:

$$\hat{x} \,|\, \psi \,\rangle \;\to\; \imath\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p_x} \psi(p_x) \tag{2.9.4}$$

(domeni su analogni kao u T 2.8.1 i T 2.8.2).

2.9.3 Transformacija sa koordinatne reprezentacije na impulsnu

Vredno je posebno istaći kako se prelazi sa koordinatne na impulsnu reprezentaciju u $\mathcal{H}_x$ i obratno (uporediti § 2.7.9).

Svojstveni problem od $\hat{p}_x$ u x-reprezentaciji glasi

$$-\imath\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \varphi^{(p_x)}(x) = p_x \varphi^{(p_x)}(x), \tag{2.9.5}$$

a rešenja su mu (kao što je poznato iz teorije običnih diferencijalnih jednačina):

$$\{\varphi^{(p_x)}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, x \mid p_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{\imath}{\hbar} p_x x} \mid -\infty < p_x < \infty\}. \tag{2.9.6}$$

To su tzv. *ravni talasi.*

Zadatak 2.9.1 Na osnovu poznate integralne Fourier-ove formule

$$f(a_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(a) e^{\imath b(a-a_0)} \,\mathrm{d}a \,\mathrm{d}b \tag{2.9.7}$$

i definicije delta funkcije

$$f(a_0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(a) \delta(a - a_0) \,\mathrm{d}a, \tag{2.9.8}$$

može se pisati

$$\delta(a-a_0)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\imath b(a-a_0)}\,\mathrm{d}b. \tag{2.9.9}$$

a) Pokazati, koristeći se formulom (2.9.9), da su ravni talasi $\varphi^{(p_x)}(x)$ iz (2.9.6) ortonormirani na delta funkciju:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^{(p_x)^*}(x)\varphi^{(p'_x)}(x)\,\mathrm{d}x=\delta(p_x-p'_x). \tag{2.9.10}$$

b) Pokazati da ravni talasi (2.9.6) zadovoljavaju faznu konvenciju (2.9.2b).

Zadatak 2.9.2 a) Pokazati da uslov kompletnosti $\int_{-\infty}^{\infty}\mid p_x\,\rangle\,\mathrm{d}p_x\langle p_x\mid=\hat{I}$ u $\mathcal{H}_x$ u koordinatnoj reprezentaciji glasi:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^{(p_x)}(x)\,\mathrm{d}p_x\varphi^{(p_x)}(x')=\delta(x-x'). \tag{2.9.11}$$

b) Pokazati da za ravne talase (2.9.6) važi uslov kompletnosti (2.9.11).

Rešivši svojstveni problem (2.9.5), možemo primeniti opšte formule (2.7.40a)-(2.7.40b) na prelazak sa koordinatne na impulsnu reprezentaciju: $\psi(p_x)=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^{(p_x)*}(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x$, $\Rightarrow$

$$\psi(p_x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\imath}{\hbar}p_xx}\psi(x)\,\mathrm{d}x; \tag{2.9.12a}$$

$C(p_x,p'_x)=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^{(p_x)^*}(x)C(x,x')\varphi^{(p'_x)}(x')\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x'$, $\Rightarrow$

$$C(p_x,p'_x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\imath}{\hbar}p_xx}C(x,x')e^{\frac{\imath}{\hbar}p'_xx'}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x'. \tag{2.9.12b}$$

Zadatak 2.9.3 Izvesti konkretne formule obratne transformacije.

2.9.4 Uopštenje na jednu i više čestica

U orbitnom prostoru stanja $\mathcal{H}_o$ *jedne realne čestice impulsnu reprezentaciju*[2.9.1] definiše kompletna vektorska opservabla $\hat{\mathbf{p}}$. Sa $\mathcal{H}_o$ prelazi se na $\mathcal{L}^2(\mathbf{p})$, Hilbert-ov prostor svih po modulu kvadratno integrabilnih funkcija $\psi(\mathbf{p})$. Opet važi $\mathcal{L}^2(\mathbf{p})=\mathcal{L}^2(p_x)\otimes\mathcal{L}^2(p_y)\otimes\mathcal{L}^2(p_z)$; opservable osnovnog skupa, $\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}}$, imaju jednostavnu formu itd. $|\psi(p)|^2$ je gustina verovatnoće da se merenjem $\hat{\mathbf{p}}$ dobije rezultat oko $\mathbf{p}$.

Analogno važi za sistem od N čestica.

2.9.5 Energetska reprezentacija

U sledećem odeljku ćemo videti da tzv. hamiltonijan, tj. opservabla koja se dobija kvantizacijom klasične Hamilton-ove funkcije, a čije svojstvene vrednosti imaju fizički smisao energetskih nivoa kvantnog sistema, igra u dinamici kvantne mehanike isto tako fundamentalnu ulogu kao Hamilton-ova funkcija u klasičnoj mehanici.

[2.9.1] Pri ortonormalizaciji svojstvenog bazisa $\{|\,\mathbf{p}\rangle\mid\forall\mathbf{p}\}$ na delta funkciju piše se u $\mathcal{H}_o$: $\langle\,\mathbf{p}\mid\mathbf{p}'\rangle=\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$, gde je $\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')=\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$.

Pod pretpostavkom da hamiltonijan $\hat{H}$ kvantnog sistema ima čisto diskretan spektar i da se može pogodno dopuniti do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli, reprezentacija koja je tim skupom definisana naziva se *energetskom reprezentacijom.* Videćemo to detaljnije u § 9.2.7, na konkretnom primeru.

Na jeziku opšte teorije, ovde se očigledno radi o $\hat{D}$-reprezentaciji. Reprezententi opservabli su matrice. Formulacija kvantne mehanike u ovoj reprezentaciji naziva se *matričnom mehanikom.*

Matrična mehanika (vezana za ime Wernera Heisenberg-a) pojavila se otprilike paralelno sa Schrödinger-ovom talasnom mehanikom. Tek kasnije se shvatilo da su ove dve teorije ekvivalentne i da se dobijaju iz Dirac-ove apstraktne kvantne mehanike (koja se pojavila kasnije) postupkom reprezentovanja.

Glava 3

DINAMIKA KVANTNE MEHANIKE

3.1 Integralni vid zakona kretanja

Zakon kretanja nam kaže kako se stanje kvantnog sistema menja u toku vremena kad je sistem prepušten samom sebi, tj. kada se radi o spontanoj promeni (za razliku od promene izazvane merenjem). O integralnom vidu zakona kretanja je reč kada proučavamo pomenutu promenu stanja za konačni vremenski interval (za razliku od infinitezimalnog datog sa dt). Integralni vid zakona kretanja, što je predmet ovog odeljka, baziraćemo na Dirac-ovim fizičkim idejama, koje ćemo formulisati kao Postulat i iz njega izvesti evolucioni operator $\hat{U}$ i hamiltonijan $\hat{H}$.

3.1.1 Dinamička podela fizičkih sistema — kvalitativna verzija

U kvantnoj kao i u klasičnoj fizici u dinamičkom pogledu možemo da razlikujemo pet vrsta fizičkih sistema, tako da je svaka specijalni slučaj prethodne:

1. Fizički sistem i ostatak vasione su dva *podsistema*, tj. fizički sistem ima tzv. *kinematičku nezavisnost* od tzv. svoje okoline: postoje određene fizičke osobine i/ili parametri koji stalno i jednoznačno određuju sistem. (Primere videti niže.)

2. Fizički sistem ima *dinamičku nezavisnost* od svoje okoline, tj. sistem je kinematički nezavisan podsistem sveta na koji njegova okolina deluje (u specijalnom slučaju ovo delovanje može biti nula, tj. može da odsustvuje), ali se to delovanje ne menja promenom stanja sistema (tj. nema povratne sprege na okolinu). Delovanje okoline pod ovim uslovima naziva se *spoljašnjim poljem* (videti primere niže). Kontraprimer, tj. primer za sistem koji kinematički jeste a dinamički nije nezavisan, je proton u deuteronu. (Deuteron, ili jezgro teškog vodonika, sastoji se od protona i neutrona u tzv. nuklearnoj ili jakoj interakciji.) Ne može se definisati spoljašnje polje koje bi poticalo od neutrona a delovalo na proton, jer delovanje neutrona na proton zavisi od trenutnog stanja protona i menja se sa promenom tog stanja.

3. Fizički sistem je *konzervativan* (za spoljašnje polje takođe se kaže da je konzervativno). Ovo je slučaj kada se energija sistema u toku vremena konzerviše (održava) i pored eventualnog

prisustva spoljašnjeg (konzervativnog) polja (primer niže). Kontraprimer, tj. primer za dinamički nezavisan, nekonzervativan sistem, imamo kad god se vrši pumpanje energije iz okoline u sistem (na primer proton u promenljivom elektromagnetnom polju ciklotrona), ili obratno, kada okolina crpi energiju iz sistema (na primer čestica u Wilson-ovoj komori).

4. Fizički sistem je *izolovan* kada se ne nalazi u spoljašnjem polju, tj. kada na njega okolina ne utiče (primer pod 5.). Kontraprimer, tj. primer za konzervativan a neizolovan sistem je elektron u polju jezgra.

5. Fizički sistem se sastoji od *slobodnih čestica*. Ovo je slučaj kada je sistem čestica izolovan, a čestice ne interaguju međusobno. Kontraprimer je izolovani sistem interagujućih čestica.

Ponekad se u literaturi unutar konzervativnih sistema ne razlikuju eksplicitno izolovani sistemi od neizolovanih, a katkad se u ovakvom slučaju termin „konzervativan" zamenjuje terminom „izolovan".

3.1.2 Fizičke ideje u postulatu o zakonu kretanja

Ako kvantni sistem nije dinamički nezavisan, onda se za njega samog ne može formulisati zakon kretanja (nezavisno od okoline), već samo može biti obuhvaćen u sastavu nekog nadsistema koji jeste dinamički nezavisan. A što se tiče dinamički nezavisnog sistema, koji ćemo nazivati odsad *opštim slučajem*, prirodno je očekivati da je za njega moguće formulisati zakon kretanja.

Veoma plauzabilni *Dirac-ov prilaz* uspostavljanju zakona kretanja formulisaćemo u vidu novog postulata kvantne mehanike.

VI POSTULAT O ZAKONU KRETANJA

a) Stanje kvantnog sistema se unutar prostora stanja sistema menja u vremenu *kauzalno*;

b) pri promeni stanja *održava se superpozicija* stanja;

c) *broj* fizičkih *sistema* u kvantnom ansamblu se u toku vremena *održava*;

d) promena stanja kontinualno zavisi od vremena.

Zahtev VI.a) se ponekad naziva *principom kauzalnosti* kvantne fizike. On iskazuje misao da stanje sistema u trenutku $t > t_0$ zavisi *jednoznačno* od početnog stanja (tj. stanja u početnom trenutku t_0), od strukture sistema i od eventualnog spoljašnjeg polja. Dakle, u evoluciji stanja nema statističnosti, indeterminizma.

Prema zahtevu VI.a), promena stanja u vremenu odvija se u prostoru stanja sistema. Za $N-$čestični sistem to znači da se odvija u prostoru $\mathcal{H}^{(0)}_{1\dots N}$. Samim tim se održava broj čestica (N) u sistemu. (Ne mešati to sa održavanjem broja sistema — u ovom slučaju $N-$čestičnih sistema — u kvantnom ansamblu, što zahteva VI.c).)

Što se tiče zahteva VI.b), videli smo u odeljku § 1.3 da je princip superpozicije, koji iskazuje mogućnost superponiranosti stanja, od fundamentalnog značaja za kvantnu mehaniku. Da se

podsetimo (uporediti pretposlednji pasus u § 2.1.2), neka su ψ, φ i χ tri normirana vektora stanja i neka je

$$\psi = c_1\varphi + c_2\chi, \tag{3.1.1}$$

gde su c_1 i c_2 kompleksni brojevi. Kaže se da su u stanju ψ *superponirana* (ili koherentno pomešana) stanja φ i χ. Pretpostavimo da (3.1.1) važi u trenutku t_0: $\psi(t_0) = c_1\varphi(t_0) + c_2\chi(t_0)$ i pretpostavimo da u trenutku $t > t_0$ pomenuta tri stanja evoluiraju u $\psi(t)$, odnosno $\varphi(t)$, odnosno $\chi(t)$. VI.b) onda iskazuje da važi:

$$\psi(t) = c_1\varphi(t) + c_2\chi(t) \tag{3.1.2}$$

za svaki izbor $\psi(t_0)$, $\varphi(t_0)$, $\chi(t_0)$ i kompleksnih brojeva c_1 i c_2 (za koji važi (3.1.1)). Drugim rečima, zahteva se da svaka komponenta u razlaganju (3.1.1) evoluira nezavisno jedna od druge.

Zahtev VI.c) je veoma prirodan s obzirom da je kvantna mehanika koju proučavamo u stvari nerelativistička grana fizike i stoga procesi kreacije i anihilacije čestica ne dolaze u obzir[3.1.1]. (U ovim procesima se bitno koristi Einstein-ova relativistička relacija za masu i energiju $E = mc^2$.)

Vektor stanja ψ opisuje homogen ansambl od recimo N kvantnih sistema; međutim, u skladu sa pojmom verovatnoće (i relativne frekvencije), ψ se normira ne na N nego na 1. Fizički smisao toga je da se radi o jednom (proizvoljnom) predstavniku ansambla. Zahtev VI.c) stoga u stvari iskazuje da je ovaj jedan predstavnik ansambla u toku vremena nepromenjeno i neokrnjeno stalno prisutan. Šta to znači na jeziku formalizma kvantne mehanike?

Neka je $\hat{A}$ opservabla sa čisto diskretnim spektrom čiji je spektralni vid $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$ ($n' \neq n \Rightarrow a_{n'} \neq a_n$, $\sum_n \hat{P}_n = \hat{I}$). Zapitajmo se kolika je verovatnoća da se pri merenju opservable $\hat{A}$ u stanju ψ dobije uopšte neka od vrednosti $a_1, a_2, \ldots$. Odgovor glasi da je ova verovatnoća jednaka $\sum_n v(a_n) = \sum_n \langle \psi \mid \hat{P}_n \mid \psi \rangle = \langle \psi \mid \sum_n \hat{P}_n \mid \psi \rangle = \langle \psi \mid \psi \rangle = 1$. Znači, stalno prisustvo pomenutog predstavnika ansambla izražava se zahtevom[3.1.2]

$$\langle \psi(t) \mid \psi(t) \rangle = 1, \quad \forall t \geq t_0 \tag{3.1.3}$$

što je precizna forma VI.c).

Zahtev VI.d) znači da za vremenski interval koji teži nuli i promena stanja teži nuli, tj. da nema trenutne promene[3.1.3]. Isti zahtev takođe iskazuje da promena stanja neprekidno zavisi od početnog trenutka od kojeg posmatramo promenu.

3.1.3 Evolucioni operator

Postavlja se pitanje kako Postulat o zakonu kretanja uklopiti u formalizam kvantne mehanike.

[3.1.1] U nekim nuklearnim reakcijama protoni se pretvaraju u neutrone ili obratno. Međutim, nerelativistička kvantna mehanika i to opisuje tretirajući neutron i proton kao dva (izospinska) stanja nukleona (a broj nukleona se održava).

[3.1.2] U stvari, naš zaključak da se pri merenju opservable $\hat{A}$ sigurno dobije neka od njenih svojstvenih vrednosti pored pretpostavke sigurnog prisustva predstavnika ansambla uključuje i pretpostavku da se radi o idealnom eksperimentu. Realni eksperiment merenja može da zakaže, može da se ne dobije nijedan rezultat i kada je sistem sigurno prisutan.

[3.1.3] Čitalac će u ovoj ideji verovatno prepoznati jedan od osnovnih principa klasične fizike, koji je u Newton-ovo vreme prikladno formulisan rečima: *Natura non facit saltus* (što na latinskom znači: priroda ne čini skokove).

Pretpostavimo da se stanje sistema u $t > t_0$, $\psi(t)$, može dobiti iz stanja sistema u početnom trenutku $\psi(t_0)$ delovanjem nekog operatora $\hat{U}$ u prostoru stanja $\mathcal{H}$: $\psi(t) = \hat{U}\psi(t_0)$. Operator $\hat{U}$, tzv. *evolucioni operator*, onda, u smislu našeg tumačenja zahteva VI.a), mora zavisiti od strukture kvantnog sistema i od eventualnog spoljašnjeg polja[3.1.4] (tretiraćemo ovu zavisnost kao implicitnu, tj. od nje zavisi izbor operatora $\hat{U}$); a mora, u opštem slučaju, $\hat{U}$ da zavisi i od početnog trenutka t_0 i od dužine vremenskog intervala[3.1.5] $t - t_0$:

$$\boxed{\psi(t) = \hat{U}(t - t_0, t_0)\psi(t_0)}. \tag{3.1.4}$$

Formula (3.1.4) naziva se kvantno mehaničkim *zakonom kretanja* (ili *dinamičkim zakonom*) u tzv. Schrödinger-ovoj slici. Preciznije, kaže se da je to *integralni vid* zakona kretanja, jer se radi o promeni stanja u konačnom vremenskom intervalu (za razliku od infinitezimalnog intervala dt).

Pošto smo VI.a) inkorporirali u vid zakona kretanja (3.1.4), VI.b) u obliku (3.1.1) $\Rightarrow$ (3.1.2) odmah ima za posledicu da $\hat{U}$ mora biti *linearni operator*; naime, moramo imati

$$\hat{U}\psi(t_0) = c_1\hat{U}\varphi(t_0) + c_2\hat{U}\chi(t_0) \tag{3.1.5}$$

kad god imamo $\psi(t_0) = c_1\varphi(t_0) + c_2\chi(t_0)$, i to za bilo kakav izbor entiteta $\varphi(t_0)$, $\chi(t_0)$, c_1 i c_2.

VI.c) u obliku (3.1.3) zahteva da $\hat{U}$ održava normu svakog vektora u $\mathcal{H}$. Moramo raščistiti šta to znači.

Lema 3.1.1 *Ako je linearni operator $\hat{A}$ definisan za svaki vektor iz $\mathcal{H}$ i održava normu svakog vektora, onda $\hat{A}$ održava i skalarni proizvod svaka dva vektora.*

Dokaz: Neka su ψ i φ dva proizvoljna vektora iz $\mathcal{H}$. Po pretpostavci imamo:

$$(\psi+\varphi,\psi+\varphi) = (\hat{A}(\psi+\varphi,\psi+\varphi), \hat{A}(\psi+\varphi,\psi+\varphi)), \quad (\psi+\imath\varphi,\psi+\imath\varphi) = (\hat{A}(\psi+\imath\varphi,\psi+\imath\varphi), \hat{A}(\psi+\imath\varphi,\psi+\imath\varphi)). \tag{3.1.6a,b}$$

Ako se još jedanput koristimo održanjem norme u (3.1.6*a*), dobijamo

$$(\psi,\varphi) + (\varphi,\psi) = (\hat{A}\psi,\hat{A}\varphi) + (\hat{A}\varphi,\hat{A}\psi), \tag{3.1.6c}$$

a (3.1.6*b*) se analogno svodi na

$$\imath(\psi,\varphi) - \imath(\varphi,\psi) = \imath(\hat{A}\psi,\hat{A}\varphi) - \imath(\hat{A}\varphi,\hat{A}\psi). \tag{3.1.6d}$$

Deleći (3.1.6*d*) sa $\imath$, dodajući rezultat toga na (3.1.6*c*), pa deleći sa 2 najzad imamo

$$(\psi,\varphi) = (\hat{A}\psi,\hat{A}\varphi) \tag{3.1.7}$$

Q. E. D.

Kao što je poznato, (3.1.7) je jedna od definicija unitarnog operatora[3.1.6]. Dakle, VI.c) u stvari povlači da je evolucioni operator nužno *unitaran*.

[3.1.4] Treba imati na umu da operator predstavlja jednoznačno preslikavanje, a to je matematička forma fizičke ideje kauzalnosti.

[3.1.5] U literaturi se evolucioni operator u opštem obliku obično piše kao funkcija početnog i krajnjeg trenutka. Mi, međutim, naznačujemo dužinu intervala kao drugu nezavisno promenljivu umesto krajnjeg trenutka imajući u vidu najvažniji specijalni slučaj konzervativnih sistema. Kod njih, kao što ćemo videti u § 3.1.8, zavisnost od početnog trenutka otpada i ostaje samo zavisnost od dužine intervala.

[3.1.6] *U stvari u beskonačno dimenzionalnom prostoru $\mathcal{H}$ unitarni operator pored (3.1.7) mora da ima i osobinu da mu se i domen i oblast likova poklapaju sa celim $\mathcal{H}$. Mi to (prećutno) pretpostavljamo za evolucioni operator, jer kvantni sistem kako u t_0 tako i u $t > t_0$ može u principu biti u bilo kom stanju.

3.1.4 Hamiltonijan

Postavlja se pitanje kako zavisnost evolucionog operatora $\hat{U}$ od strukture kvantnog sistema (i eventualnog spoljašnjeg polja) učiniti eksplicitnim. Pre svega moramo se zapitati da li to treba postići neposredno sa $\hat{U}$, ili treba $\hat{U}$ izraziti kao funkciju drugog, pogodnijeg operatora.

Podsetimo se na jedan stav, koji se dokazuje u teoriji Hilbert-ovih prostora.

Stav 3.1.1 *Za svaki unapred dati unitarni operator $\hat{A}$ u $\mathcal{H}$ postoji hermitski operator $\hat{B}$ u $\mathcal{H}$ tako da važi*

$$\hat{A} = e^{\imath\hat{B}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\imath\hat{B})^n}{n!} \tag{3.1.8}$$

i obratno, za svaki unapred dati hermitski operator $\hat{B}$, operator $\hat{A}$ definisan DS-om od (3.1.8) postoji i unitaran je.

***Napomena* 3.1.1** Operatorska funkcionalna veza (3.1.8) prenosi se u analognu jednostavnu vezu između spektralnih formi od $\hat{A}$ i $\hat{B}$. Ako recimo $\hat{B}$ ima spektralnu formu $\hat{B} = \sum_n b_n \hat{P}_n$, onda $\hat{A}$ ima spektralni vid $\hat{A} = \sum_n e^{\imath b_n} \hat{P}_n$ (sa istim svojstvenim projektorima!). To se neposredno uopštava na slučaj kada $\hat{B}$ i $\hat{A}$ imaju i kontinualni spektar.

Imajući još uvek u vidu opšti slučaj, usled toga što je zavisnost evolucionog operatora kako od dužine intervala tako i od početnog trenutka kontinualna (zahtev VI.d)), možemo evolucioni operator za infinitezimalni interval vremena napisati u vidu[3.1.7]:

$$\hat{U}(\,\mathrm{d}t, t) = \hat{I} - \frac{\imath}{\hbar}\,\mathrm{d}t\hat{H}(t), \tag{3.1.9}$$

gde je $\hat{I}$ identični operator, jednak nultom stepenu drugog sabirka. LS od (3.1.9) je po definiciji evolucioni operator s tačnošću do prvog reda, a DS je prvi red eksponencijalne funkcije (3.1.8) sa $\hat{B} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{\hbar}\,\mathrm{d}t\hat{H}(t)$. U tom smislu je (3.1.9) tačna a ne približna jednakost.

Pošto $\hbar$ ima dimenzije dejstva, a vreme i energija se po dimenziji dopunjuju do dejstva, izložitelj u srednjem izrazu u (3.1.8) je bez dimenzija — što je neophodno za konzistentnost eksponencijalnog izraza u (3.1.8) — samo ako hermitski operator, tj. opservabla $\hat{H}(t)$, ima dimenziju energije[3.1.8]. Operator $\hat{H}(t)$ iz (3.1.9) naziva se *hamiltonijanom* kvantnog sistema i to je opservabla koja će, kao i u klasičnoj fizici, svojom funkcionalnom zavisnošću od osnovnog skupa opservabli nositi informaciju o *strukturi* kvantnog sistema (i eventualno spoljašnjeg polja).

3.1.5 Veza između evolucionog operatora i hamiltonijana

Da bismo funkcionalnu zavisnost evolucionog operatora od hamiltonijana uopštili sa infinitezimalnog na konačni interval evolucije, uočimo prvo jednu važnu posledicu definicije evolucionog operatora (3.1.4).

[3.1.7]*Strogo uzevši, mi ovde pojačavamo pretpostavku kontinualne zavisnosti $\hat{U}(t-t_0, t_0)$ od $t-t_0$ u pretpostavku analitičke zavisnosti.

[3.1.8]Naše rezonovanje se ovde, kao manje-više i u celom odeljku, oslanja prvenstveno na intuitivnu plauzibilnost, što je sa tačke gledišta fizičara sasvim zadovoljavajuće. Ali što se tiče stroge logičnosti našeg rezonovanja, valja primetiti da ćemo mi nužnost izbora $\hat{B} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\hbar}\,\mathrm{d}t\hat{H}(t)$ (uporediti (3.1.8) i (3.1.9)) shvatiti tek u § 3.3.7.

Korolar 3.1.1 *U opštem slučaju kvantnog sistema za svaka tri trenutka $t_2 \geq t_1 \geq t_0$ važi*

$$\hat{U}(t_2 - t_0, t_0) = \hat{U}(t_2 - t_1, t_1)\hat{U}(t_1 - t_0, t_0). \tag{3.1.10}$$

Dokaz: Zamenjujući t sa t_2 u (3.1.4) imamo

$$\psi(t_2) = \hat{U}(t_2 - t_0, t_0)\psi(t_0). \tag{3.1.11}$$

S druge strane, ako u (3.1.4) zamenimo t sa t_2, a t_0 sa t_1, onda (3.1.4) daje $\psi(t_2) = \hat{U}(t_2 - t_1, t_1)\psi(t_1)$. Vratimo se na (3.1.4) i stavimo t_1 umesto t; dobićemo $\psi(t_1) = \hat{U}(t_1 - t_0, t_0)\psi(t_0)$. Supstitucijom $\psi(t_1)$ iz poslednje u pretposlednju jednakost dolazimo do

$$\psi(t_2) = \hat{U}(t_2 - t_1, t_1)\hat{U}(t_1 - t_0, t_0)\psi(t_0). \tag{3.1.12}$$

Pošto su LS-e od (3.1.11) i (3.1.12) jednake, jednake su i DS-e. A usled toga što je $\psi(t_0)$ proizvoljan vektor u $\mathcal{H}$, konačno dobijamo operatorsku jednakost (3.1.10). *Q. E. D.*

Treba uočiti da u nekonzervativnom slučaju, kada $\hat{U}$ zavisi od početnog trenutka, skup svih evolucionih operatora ne čini grupu. Naime, proizvod dva evoluciona operatora nužno daje evolucioni operator samo ako je završni trenutak prvog zdesna faktora jednak početnom trenutku drugog zdesna faktora kao u (3.1.10).

Ako u (3.1.10) zamenimo t_1 sa t, a t_2 sa $t + \Delta t$, onda (3.1.10) postaje

$$\hat{U}(t + \Delta t - t_0, t_0) = \hat{U}(\Delta t, t)\hat{U}(t - t_0, t_0). \tag{3.1.13}$$

Pretpostavimo da evolucioni operator možemo da razvijemo u Taylor-ov red do prvog reda kao funkciju trenutka t. U tom smislu pišemo $\mathrm{d}t$ umesto konačnog priraštaja Δt u (3.1.13), $\hat{U}(\mathrm{d}t, t)$ zamenjujemo iz (3.1.9) i dolazimo do

$$\hat{U}(t - t_0, t_0) + d\hat{U}(t - t_0, t_0) = \hat{U}(t - t_0, t_0) - \frac{\imath}{\hbar}\,\mathrm{d}t\hat{H}(t)\hat{U}(t - t_0, t_0).$$

Ova jednakost se očigledno svodi na sledeću *diferencijalnu jednačinu za evolucioni operator*:

$$\boxed{\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}(t-t_0,t_0)}{\mathrm{d}t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t - t_0, t_0)}, \quad \forall t \geq t_0. \tag{3.1.14}$$

Odmah se vidi da se (3.1.14) može prepisati u vidu *integralne jednačine*:

$$\hat{U}(t - t_0, t_0) = \hat{I} - \frac{\imath}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}(t')\hat{U}(t' - t_0, t_0)\,\mathrm{d}t'. \tag{3.1.15}$$

U (3.1.15) je ugrađen (u vidu „integracione konstante") tzv. *početni uslov* za evolucioni operator:

$$\hat{U}(0, t_0) = \hat{I}, \tag{3.1.16}$$

koji očigledno sledi iz (3.1.4) i koji u stvari dopunjuje (3.1.14). U stvari (3.1.14) zajedno sa (3.1.16) ekvivalentno[3.1.9] je sa (3.1.15).

[3.1.9]*Jednakost (3.1.14) izveli smo iz Postulata o zakonu kretanja kao potreban uslov. Međutim, u praksi se (3.1.14) sa (3.1.16) i (3.1.15) koriste kao potreban i dovoljan uslov, tj. svaki par $\hat{U}$, $\hat{H}$ koji ih zadovoljava smatra se da odgovaraju jedan drugom u smislu da opisuju isti kvantni sistem.

3.1.6 Dinamička podela — preciznije

Pošto smo evolucioni operator povezali sa hamiltonijanom i to sa svrhom da preko hamiltonijana definišemo kvantni sistem, sad možemo da se vratimo na temu paragrafa § 3.1.1 i da damo preciznu ili kvantitativnu verziju *dinamičke podele* kvantnih sistema.

Videli smo da za *dinamički nezavisan* kvantni sistem imamo najopštiji slučaj u kom možemo definisati evolucioni operator i hamiltonijan.

U slučaju da je sistem *konzervativan*, nema razmene energije sa okolinom i stoga ne postoje procesi koji bi izvesne vremenske trenutke učinili fizički različivim od drugih. Svi su vremenski trenuci nerazličivi, tj. imamo *homogenost* vremenske ose (koja postoji i *a priori*, kinematički; uporediti § 5.1.1 i § 5.1.7). Ali ovo je još uvek intuitivno i kvalitativno rezonovanje.

U preciznom i kvantitativnom pristupu homogenost vremenske ose sastoji se u tome da za koji god realni broj b translirali sistem po vremenskoj osi (u mislima), ne dobijamo opservabilni, tj. u merenju ispoljivi, efekat. A, to sa svoje strane, u stvari znači da ako u nekom trenutku t_0 i drugom trenutku $t_0 + b$ $(-\infty < b < +\infty)$ jednako prepariramo stanje fizičkog sistema i pustimo ga da (spontano) evoluira za istu dužinu vremenskog intervala $t - t_0$, na krajevima tih intervala, tj. u trenucima t i $t + b$, imaćemo jednaka stanja. Kratko rečeno, u jednakim vremenskim intervalima, bez obzira na početni trenutak, sistem jednako evoluira.

U formalizmu to znači

$$\hat{U}(t-t_0, t_0) = e^{\imath\lambda(b)}\hat{U}(t-t_0, t_0+b), \quad -\infty < b < +\infty, \tag{3.1.17a}$$

jer razlika u faznom faktoru je najveća razlika u evolucionom operatoru (ili ekvivalentno u stanju u koje sistem evoluira) koja je neopservabilna. Znači, (3.1.17a) izražava precizno homogenost vremenske ose u kvantnoj mehanici, a ona je ekvivalentna konzervativnosti sistema.

Nepisano, mnogo korišćeno, pravilo u kvantnoj mehanici kaže da slobodu u faznim faktorima vektora stanja kad god možemo ograničavamo tako da postignemo pojednostavljenje formalizma (uporediti na primer faznu konvenciju u svojstvenom bazisu od $\hat{x}$, (2.5.16)). Očigledno, stavljajući

$$\lambda(b) = 0, \quad -\infty < b < +\infty \tag{3.1.17b}$$

u (3.1.17a) postižemo pojednostavljenje da *evolucioni operator* ne *zavisi* od početnog (ili ekvivalentno od krajnjeg) trenutka, već samo od dužine intervala. Ovaj iskaz je, dakle, definicija konzervativnosti sistema na jeziku evolucionog operatora. Za konzervativni sistem pisaćemo evolucioni operator u vidu $\hat{U}(t-t_0)$, tj. bez zavisnosti od početnog trenutka.

Pošto je hamiltonijan još važniji od evolucionog operatora, pokušajmo izraziti kriterijum konzervativnosti na jeziku tog operatora. U tu svrhu prepišimo (3.1.14) za konzervativni sistem u vidu

$$\hat{H}(t) = \imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}(t-t_0)}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{-1}(t-t_0). \tag{3.1.18}$$

Sad evolucioni operator ne zavisi od krajnjeg trenutka t, a to ima za posledicu da i DS od (3.1.18) ne zavisi od trenutka t i isto mora da važi i za LS-u. Dakle, ako je sistem konzervativan, onda *hamiltonijan ne zavisi od vremena*. Da važi i obratno uverićemo se u paragrafu § 3.1.8.

Kvantni sistem je *izolovan* ako i samo ako je hamiltonijan funkcija samo osnovnog skupa opservabli sistema, bez ikakvih veličina koje bi definisala okolina sistema.

Hamiltonijan sistema *slobodnih čestica* je zbir operatora kinetičkih energija pojedinih čestica (kao i u klasičnom slučaju).

3.1.7 *Dyson-ov red

Vratimo se na opšti slučaj kvantnog sistema sa hamiltonijanom koji zavisi od vremena i zapitajmo se kako da *rešimo* (3.1.14) ili (3.1.15) i dobijemo $\hat{U}(t-t_0)$ kao eksplicitnu funkciju od $\hat{H}(t)$.

Integralna jednačina kao što je (3.1.15) se obično rešava *iterativnom metodom*: U prvoj iteraciji možemo celu DS-u od (3.1.15) staviti umesto evolucionog operatora pod integralom i tako dobiti

$$\hat{U}(t-t_0,t_0)=\hat{I}-\frac{\imath}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t')\,\mathrm{d}t'+(-\frac{\imath}{\hbar})^2\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\hat{U}(t_2-t_0,t_0).$$

Ako iteracija konvergira (za šta nemamo *a priori* kriterijum), posle beskonačno mnogo koraka očigledno dolazimo do formule

$$\hat{U}(t-t_0,t_0)=\hat{I}+\sum_{n=1}^{\infty}(-\frac{\imath}{\hbar})^n\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\ldots\int_{t_0}^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\ldots\hat{H}(t_n),\qquad(3.1.19a)$$

a proizvod od n operatora u inegralu je *vremenski uređen*:

$$t_1\geq t_2\geq\ldots\geq t_n.\qquad(3.1.19b)$$

Formule (3.1.19) predstavljaju tzv. *Dyson-ov* (čitati: Dajsonov) red, koji je značajan za nekonzervativne kvantne sisteme kod kojih hamiltonijani u različitim trenucima ne moraju da komutiraju. Ovakvi problemi se često pojavljuju u kvantnoj elektrodinamici.

Dyson-ov red može da se napiše i na drugi način ako uvedemo tzv. *vremenski-uređeni proizvod* operatora:

$$T[\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\ldots\hat{H}(t_n)]\stackrel{\mathrm{def}}{=}\hat{H}(t_{p_1})\hat{H}(t_{p_2})\ldots\hat{H}(t_{p_n}),\qquad(3.1.20a)$$

gde je permutacija

$$p\stackrel{\mathrm{def}}{=}\begin{pmatrix}1&2&\ldots&n\\p_1&p_2&\ldots&p_n\end{pmatrix}\qquad(3.1.20b)$$

($p_1,p_2,\ldots,p_n$ je permutacija brojeva 1,2,...,n) definisana tako da važi

$$t_{p_1}\geq t_{p_2}\geq\ldots\geq t_{p_n}\qquad(3.1.20c)$$

((3.1.20a) se engleski naziva *time-ordered product* (čitati: tajm orderd prodakt), otud T).

Ako se koristimo sa (3.1.20a), onda poredak operatora pod integralima u (3.1.19a) nije važan: možemo dozvoliti sve permutacije vremenskih trenutaka integranda i da svaki integral ide od t_0 do t, ali moramo to kompenzovati brojem permutacija $n!$ u imenitelju[3.1.10]. Tako da (3.1.19a) možemo da prepišemo u vidu:

$$\hat{U}(t-t_0,t_0)=\hat{I}+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\frac{\imath}{\hbar})^n}{n!}\int_{t_0}^{t}\ldots\int_{t_0}^{t}T[\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\ldots\hat{H}(t_n)]\,\mathrm{d}t_1\ldots\mathrm{d}t_n.\qquad(3.1.21)$$

[3.1.10] Zanemarujemo skup svih permutacija trenutaka sa ponavljanjem. Može se pokazati da to ne menja vrednost integrala (da je mere nula).

Ako Dyson-ov red konvergira i važi *komutativnost*

$$[\hat{H}(t'), \hat{H}(t)] = 0, \quad \forall t', \quad t \geq t_0, \tag{3.1.22}$$

onda poredak operatora u (3.1.19*a*) ili (3.1.21) nije važan i tako dolazimo do sledećeg vida za $\hat{U}$:

$$\hat{U}(t - t_0, t_0) = \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\frac{\imath}{\hbar})^n}{n!} (\int_{t_0}^{t} \hat{H}(t')\,\mathrm{d}t')^n. \tag{3.1.23}$$

Desna strana od (3.1.23) je eksponencijalni red, tj.

$$\hat{U}(t - t_0, t_0) = \exp[(-\frac{\imath}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \hat{H}(t')\,\mathrm{d}t']. \tag{3.1.24}$$

Da kratko rezimiramo, (3.1.24) važi u komutativnom konvergentnom slučaju ne nužno konzervativnog polja.

3.1.8 Konzervativni sistemi

Precizno karakterisanje konzervativnih kvantnih sistema, koji čine najvažniju dinamičku klasu sistema — započeli smo u paragrafu § 3.1.6, a dovršićemo ga u ovom paragrafu sledećim važnim teoremom:

Teorem 3.1.1 *Kvantni sistem je konzervativan ako i samo ako hamiltonijan sistema ne zavisi od vremena. Ako je to slučaj, onda je evolucioni operator sledeća eksponencijalna funkcija od hamiltonijana:*

$$\boxed{\hat{U}(t - t_0) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}}. \tag{3.1.25}$$

Dokaz: U paragrafu § 3.1.6 dokazali smo da je za konzervativnost sistema potrebno da hamiltonijan ne zavisi od vremena. Preostaje samo da pođemo od pretpostavke da $\hat{H}$ ne zavisi od vremena i da dokažemo da onda (3.1.25) definiše evolucioni operator. Pošto ovaj evolucioni operator očigledno ne zavisi od početnog trenutka, prema kriterijumu koji smo dokazali u § 3.1.6, onda smo sigurni da se radi o konzervativnom sistemu.
Prema stavu iz § 3.1.4, kakav god da je hermitski operator $\hat{H}$, (3.1.25) definiše jedan unitarni operator $\hat{U}(t-t_0)$. Da je to evolucioni operator vidimo iz toga što diferenciranje (3.1.25) po krajnjem trenutku t daje $\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}\hat{U}$, što znači da $\hat{U}(t - t_0)$ zadovoljava diferencijalnu jednačinu (3.1.14), koja karakteriše evolucioni operator. *Q. E. D.*

3.1.9 Lie-eva grupa vremenskih translacija

Na kraju ovog odeljka ukazaćemo u nekoliko reči na matematičku prirodu formule (3.1.25). Obeležimo sa b dužinu intervala evolucije konzervativnog sistema i prepišimo (3.1.25) u vidu

$$\hat{U}(b) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}b\hat{H}}. \tag{3.1.26}$$

Skup $\{b| - \infty < b < +\infty\}$ je aditivna (Abel-ova) grupa *vremenskih translacija*, a (3.1.26) zadaje jedan neprekidan homomorfizam ove grupe u grupu svih unitarnih operatora u prostoru stanja $\mathcal{H}$.

Obično se oblast likova homomorfizma kao što je (3.1.26), tj. $\{\hat{U}(b)| - \infty < b < +\infty\}$, naziva jednoparametarskom Lie-ovom grupom, a „parametar” b služi za identifikaciju pojedinih elemenata grupe. Za hamiltonijan $\hat{H}$ se kaže da je hermitski generator jednoparametarske grupe.

3.2 Diferencijalni vid zakona kretanja

U ovom odeljku usmerićemo našu pažnju na tendenciju promene koju stanje kvantnog sistema ima u tekućem trenutku $t > t_0$. Kao što je to slučaj i u drugim granama fizike, to se precizno i kvantitativno izražava diferencijalnim vidom zakona kretanja. Tu se određuje izvod stanja po vremenu.

Nakon što ćemo izvesti tzv. Schrödinger-ovu jednačinu, rešavaćemo je prvo za stacionarne slučajeve (karakterisane oštrom vrednošću energije), a zatim ćemo doći do opšteg rešenja na dva načina: i) pomoću tzv. potpune klasifikacije stanja i ii) pomoću svojstvenih projektora hamiltonijana. Završićemo odeljak diskusijom slobodne čestice.

3.2.1 Schrödinger-ova jednačina

Sada ćemo pristupiti izvođenju diferencijalnog vida dinamičkog zakona. Najpogodnije je poći od jednakosti (3.1.14) iz prethodnog odeljka:

$$\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}(t-t_0,t_0)}{\mathrm{d}t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t-t_0,t_0), \quad \forall t \geq t_0. \tag{3.2.1}$$

Vidi se po notaciji da se radi o opštem slučaju kvantnog sistema.

Da bismo uveli u igru vektor stanja, prepišimo i „zakon kretanja u integralnom vidu" (3.1.4):

$$|\,\psi(t)\,\rangle = \hat{U}(t-t_0,t_0)\,|\,\psi(t_0)\,\rangle, \quad \forall t \geq t_0. \tag{3.2.2}$$

Primenimo operatorsku jednakost (3.2.1) na početno stanje $|\,\psi(t_0)\rangle$ imajući u vidu da se operator u primeni na vektor diferencira analogno kao proizvod dveju funkcija:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{A}(t)\,|\,\varphi(t)\,\rangle) = \frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t}\,|\,\varphi(t)\,\rangle + \hat{A}(t)\frac{\mathrm{d}\,|\,\varphi(t)\,\rangle}{\mathrm{d}t}. \tag{3.2.3}$$

Iz (3.2.2) onda odmah sledi

$$\boxed{\imath\hbar\tfrac{\mathrm{d}|\,\psi(t)\,\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}(t)\,|\,\psi(t)\,\rangle}, \quad \forall t \geq t_0. \tag{3.2.4}$$

Pošto je početno stanje $|\,\psi(t_0)\,\rangle$ proizvoljni (normirani) vektor u $\mathcal{H}$, lako se vidi da je (3.2.4) ne samo potreban nego i dovoljan uslov za (3.2.1). Jednakost (3.2.4) je zakon kretanja u diferencijalnom vidu ili tzv. *Schrödinger-ova jednačina* za opšti slučaj kvantnog sistema.

Jednakost (3.2.4) je diferencijalna jednačina prvog reda po vremenu i u tome se ogleda kauzalnost, tj. jednoznačna određenost $|\,\psi(t)\rangle$ strukturom kvantnog sistema (izraženom kroz $\hat{H}(t)$) i početnim uslovom $|\,\psi(t_0)\rangle$. Naime, diferencijalna jednačina drugog reda, na primer, bi za potpuno određivanje $|\,\psi(t)\rangle$ zahtevala da se zada i početni uslov izvoda $\frac{\mathrm{d}|\,\psi(t)\,\rangle}{\mathrm{d}t}_{t=t_0}$ (itd. za jednačine višeg reda).

Jednakost (3.2.4) je Schrödinger-ova jednačina u apstraktnom prostoru stanja $\mathcal{H}$. U *koordinatnoj reprezentaciji* za N-čestični sistem imamo ekvivalentnu formu

$$\boxed{\imath\hbar\tfrac{\partial\psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N;t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N;t)} \tag{3.2.5}$$

(hamiltonijan pišemo nepromenjeno, ali jasno je da sada deluje u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)$; totalni izvod po vremenu je u ovom slučaju isto što i parcijalni izvod po vremenu, jer radijus vektori ne zavise od vremena).

U praksi se više koristi Schrödinger-ova jednačina u vidu (3.2.5) nego u vidu (3.2.4). Pošto se vektor stanja u reprezentaciji radijus vektora obično naziva talasnom funkcijom, jednačina (3.2.5) se često naziva *talasnom jednačinom.* Ponekad se $|\,\psi(t)\,\rangle\in\mathcal{H}$ naziva talasnim vektorom, a termin „talasna jednačina" se prenosi i na apstraktnu formu (3.2.4).

3.2.2 Stacionarna rešenja

Ograničimo se sad na *konzervativni* kvantni sistem, tj. na slučaj kada hamiltonijan ne zavisi od vremena. Onda (3.2.4) glasi:

$$\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\,\psi(t)\,\rangle}{\mathrm{d}t}=\hat{H}\,|\,\psi(t)\,\rangle. \tag{3.2.6}$$

Pošto u (3.2.6) na varijablu t deluje samo operator $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$, možemo pretpostaviti da se zavisnost od vremena u $|\,\psi(t)\,\rangle$ može odvojiti od vektora stanja i pisati

$$|\,\psi(t)\,\rangle=f(t)\,|\,\psi(t_0)\,\rangle,\quad\forall t\geq t_0 \tag{3.2.7}$$

gde je $f(t)$ brojna funkcija ($f(t)\neq 0$ zbog normiranosti vektora).

Pri ovoj tzv. *separaciji vremenske varijable*, nakon zamene (3.2.7) u (3.2.6) jednakost (3.2.6) prelazi u

$$\imath\hbar\left[\frac{1}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}\right]|\,\psi\,\rangle=\hat{H}\,|\,\psi\,\rangle \tag{3.2.8}$$

((3.2.7) je pretpostavka u smislu nagađanja; mi ćemo je na kraju morati opravdati).

Pošto DS od (3.2.8) ne zavisi od t, izraz u srednjoj zagradi na LS-i od (3.2.8) mora biti konstanta, tj. broj nezavisan od t. Obeležićemo taj broj sa E, jer mora imati dimenzije energije (kao H na DS-i).

Tako smo dobili svojstvenu jednakost hamiltonijana:

$$\boxed{\hat{H}\,|\,\psi\,\rangle=E\,|\,\psi\,\rangle}, \tag{3.2.9}$$

koja se u kontekstu zakona kretanja naziva *vremenski nezavisnom Schrödinger-ovom jednačinom*, za razliku od (3.2.6) koja se naziva *vremenski zavisnom Schrödinger-ovom jednačinon.*

S druge strane imamo

$$\imath\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}=Ef(t), \tag{3.2.10}$$

čije je opšte rešenje $f(t)=ce^{-\frac{\imath}{\hbar}Et}$ (c je konstanta).

Dakle, dobili smo rešenje u vidu

$$|\,\psi(t)\,\rangle=e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E}\,|\,E\,\rangle,\quad\forall t\geq t_0, \tag{3.2.11}$$

s tim da je E svojstvena vrednost od $\hat{H}$, a $|\,\psi\,\rangle=|\,E\,\rangle$ odgovarajući svojstveni vektor. (Stavili smo $c=e^{-\frac{\imath}{\hbar}t_0E}$.) Očigledno, još imamo potreban uslov da važi $|\,\psi(t_0)\,\rangle=|\,E\,\rangle$, tj. da je $|\,\psi(t_0)\,\rangle$ svojstveni vektor od $\hat{H}$.

Do sada smo rezonovali od pretpostavki do potrebnih uslova. Sad možemo to da obrnemo i da pođemo od početnog uslova $\mid \psi(t_0)\,\rangle = \mid E\,\rangle$, $\hat{H} \mid E\,\rangle = E \mid E\,\rangle$, kao dovoljnog uslova. Naime, iz (3.1.25) je očigledno da dobijamo (3.2.11) kao rešenje zakona kretanja, a gornje pretpostavke su zadovoljene.

Stanje koje je svojstveni vektor konzervativnog hamiltonijana naziva se *stacionarnim stanjem.* Dakle, za stacionarna početna stanja, i samo za njih, rešenja su data sa (3.2.11). To su tzv. *stacionarna rešenja* zakona kretanja (konzervativnog sistema).

3.2.3 Opšte rešenje pomoću potpune klasifikacije stanja

Pretpostavimo da hamiltonijan *konzervativnog* kvantnog sistema ima čisto diskretan spektar $\{E_n|\forall n\}$. Pretpostavimo osim toga, da smo $\hat{H}$ dopunili do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli i da smo rešili zajednički svojstveni problem tog skupa operatora i dobili zajednički svojstveni bazis $\{\mid n, \lambda_n\,\rangle \mid \forall n;\ \lambda_n = 1, 2, \ldots, d_n\}$, gde je d_n multiplicitet energetskog nivoa E_n $(d_n \leq \aleph_0)$ a λ_n prebrojava vektore bazisa koji kao svojstveni vektori od $\hat{H}$ odgovaraju istom energetskom nivou E_n.

Svojstveni bazis od $\hat{H}$ se u kontekstu zakona kretanja naziva *potpunom klasifikacijom stanja.* Termin ukazuje na dodatne kvantne brojeve od dodatnih opservabli u potpunom skupu, koje služe za klasifikovanje bazisnih vektora.

Videli smo u Dirac-ovom prilazu zakonu kretanja da se superpozicija stanja održava pri evoluciji sistema. Stoga se nameće misao da nađemo opšte rešenje Schrödinger-ove jednačine tako što ćemo početno stanje $\mid \psi(t_0)\,\rangle$ (koje je sad proizvoljno) razložiti po pomenutom bazisu, rešavati za svaku komponentu stacionarni problem i na kraju opet složiti rešenja sa istim koeficijentima. To se zaista može učiniti.

Teorem 3.2.1 *Neka je dat hamiltonijan H konzervativnog kvantnog sistema sa čisto diskretnim spektrom* $\{E_n|\forall n\}$ *i neka je dato početno stanje sistema* $\mid \psi(t_0)\,\rangle$, *koje je proizvoljan normirani vektor u* $\mathcal{H}$. *Pretpostavimo da raspolažemo jednom potpunom klasifikacijom stanja* $\{\mid n, \lambda_n\,\rangle | \forall n;\ \lambda_n = 1, \ldots, d_n\}$. *Razložimo* $\mid \psi(t_0)\,\rangle$ *po tom bazisu:*

$$\mid \psi(t_0)\,\rangle = \sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{d_n} c_{n,\lambda_n} \mid n, \lambda_n\,\rangle. \tag{3.2.12}$$

Onda opšte rešenje Schrödinger-ove jednačine glasi

$$\mid \psi(t)\,\rangle = \sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{d_n} c_{n,\lambda_n} e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_n} \mid n, \lambda_n\,\rangle, \quad t \geq t_0. \tag{3.2.13}$$

Dokaz: Očigledno se (3.2.13) za $t = t_0$ svodi na (3.2.12), dakle LS od (3.2.13) je ispravno usklađena sa početnim uslovom. Ako supstituišemo DS-u od (3.2.13) u vremenski zavisnu Schrödinger-ovu jednačinu, dobićemo

$$\imath\hbar \sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{d_n} c_{n,\lambda_n} (-\frac{\imath}{\hbar} E_n e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_n} \mid n, \lambda_n\,\rangle = \sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{d_n} c_{n,\lambda_n} e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_n} E_n \mid n, \lambda_n\,\rangle,$$

što je identitet. *Q. E. D.*

Ako hamiltonijan sadrži i kontinuirani spektar, onda se i potpuna klasifikacija stanja i opšte rešenje (3.2.13) uopštavaju na uobičajen način uopštenim svojstvenim vektorima, a zbir se dopunjuje integralom.

Dakle, opšte rešenje je lako napisati na osnovu zadatog početnog uslova ako smo prethodno rešili vremenski nezavisnu Schrödinger-ovu jednačinu, tj. našli potpunu klasifikaciju stanja.

3.2.4 Formalno opšte rešenje

Mada se Schrödinger-ova jednacina standardno rešava upravo na način koji smo izložili u prethodna dva paragrafa, ponekad je koristan i prilaz koji počiva na manje pretpostavki, tj. koji se ne oslanja na potpunu klasifikaciju stanja. I oval prilaz se zasniva na održanju superpozicije.

Teorem 3.2.2 *Neka je $\hat{H}$ hamiltonijan konzervativnog kvantnog sistema i neka ima čisto diskretan spektar i spektralnu formu*

$$\hat{H} = \sum_n E_n \hat{P}_n, \quad n \neq n' \Rightarrow E_n \neq E_{n'}. \tag{3.2.14}$$

Neka je $|\,\psi(t_0)\,\rangle$ proizvoljno početno stanje. Opšte rešenje Schrödinger-ove jednačine glasi:

$$|\,\psi(t)\,\rangle = \sum_n e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_n} \hat{P}_n \,|\,\psi(t_0)\,\rangle, \quad t \geq t_0. \tag{3.2.15}$$

Dokaz: Za $t = t_0$, (3.2.15) se svodi na $|\,\psi(t_0)\rangle =|\,\psi(t_0)\rangle$ usled razlaganja jedinice $\sum_n \hat{P}_n = \hat{I}$ (koje uvek prati spektralnu formu hermitskog operatora). Ako DS od (3.2.15) i DS od (3.2.14) uvrstimo u Schrödinger-ovu jednačinu, onda se ona svodi na identitet $\imath\hbar\sum_n(-\frac{\imath}{\hbar})E_n e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_n}\hat{P}_n \,|\,\psi(t_0)\rangle = (\sum_n E_n\hat{P}_n)(\sum_{n'} e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_{n'}}\hat{P}_{n'} \,|\,\psi(t_0)\rangle =$ $\sum_n E_n e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_n}\hat{P}_n \,|\,\psi(t_0)\,\rangle$ (koristili smo se ortogonalnošću i idempotentnošću svojstvenih projektora:$\hat{P}_n\hat{P}_{n'} =$ $\delta_{nn'}\hat{P}_n$). *Q. E. D.*

Pošto se svojstveni projektori $\hat{P}_n$ obično tretiraju samo egzistencijalno, tj. samo se pišu pošto moraju da postoje, a ne zadaju se, ovaj prilaz opštem rešenju se označava rečju „formalan". Iako elegantniji od prilaza iz prethodnog paragrafa, on je u praksi manje koristan.

Da bismo uspostavili vezu sa potpunom klasifikacijom stanja iz paragrafa § 3.2.3 napomenimo da važi

$$\hat{P}_n = \sum_{\lambda_n=1}^{d_n} |\,n,\lambda_n\,\rangle\langle n,\lambda_n\,|, \quad \forall n. \tag{3.2.16}$$

3.2.5 Slobodna čestica

U klasičnoj mehanici česticu u spoljašnjem polju opisujemo hamiltonijanom $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ (pod pretpostavkom da polje zavisi samo od položaja čestice, a ne i od brzine, recimo). Pređimo, po principu korespondencije, na kvantno opisivanje i to u koordinatnoj reprezentaciji.

Znamo da je $\hat{\mathbf{p}} = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}$, a $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ (multiplikativni operator). Stoga Schrödinger-ova jednačina glasi

$$\imath\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}',t). \tag{3.2.17}$$

Ovde je tzv. laplasijan $\Delta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, a $V(\mathbf{r})$, kao funkcija od $\mathbf{r}$, je multiplikativni operator.

Imamo slučaj konzervativnog sistema, jer potencijal (a prema tome ni hamiltonijan) ne zavisi od vremena. Ali sistem nije izolovan, jer $V(\mathbf{r})$ je spoljašnje polje. „Spoljašnjost" polja ispoljava se kroz spolja fiksirani izvor polja u koji smo stavili koordinatni početak. U arbitrarnom koordinatnom sistemu polje bi glasilo $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, gde bi $\mathbf{r}_0$ bio radijus vektor izvora poja.

Za *slobodnu česticu* Schrödinger-ova jednačina ima vid

$$\imath\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t). \tag{3.2.18}$$

Jedna *potpuna klasifikacija stanja* za slobodnu česticu daje stacionarna rešenja Schrödinger-ove jednačine:

$$\{\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{\imath}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - E(t-t_0))} | \forall \mathbf{p}\}, \quad E \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \tag{3.2.19a,b}$$

Ravni talasi $\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ iz (3.2.19), koji čine bazis u $\mathcal{U}(\mathcal{L}^2(\mathbf{r}))$, često se pišu u vidu

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{\imath(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(t-t_0))}, \tag{3.2.19c}$$

gde je $\mathbf{k} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$ talasni vektor, a $\omega \stackrel{\text{def}}{=} \frac{E}{\hbar}$ uglovna frekvencija čestice[3.2.1].

U $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ vektorska opservabla $\hat{\mathbf{p}}$ je kompletan skup kompatibilnih opservabli i njegove zajedničke svojstvene vektore — a to je bazis (3.2.19a) — prebrojavaju vektorske svojstvene vrednosti $\mathbf{p}$ od $\hat{\mathbf{p}}$.

Zadatak 3.2.1 Prodiskutovati u kolikoj meri se potpuna klasifikacija stanja (3.2.19a) uklapa u definiciju tog pojma koja je data u paragrafu § 3.2.3.

U § 6.6.5 daćemo drugu potpunu klasifikaciju stanja za slobodnu česticu, u kojoj je $\hat{H}$, dopunjen do potpunog skupa kompatibilnih opservabli uz pomoć opservable orbitnog uglovnog momenta, a ravni talasi se zamenjuju tzv. sfernim talasima.

Zadatak 3.2.2 Kao što je poznato, u hidrodinamici za nestišljivu tečnost i u elektrodinamici za električnost definišu se $\rho(\mathbf{r}, t)$ — *gustina raspodele* — i $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ — *vektor gustine struje* — i za njih važi tzv. *jednačina kontinuiteta*

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \tag{3.2.20}$$

(∇ je vektorski operator sa komponentama $(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$).

Za česticu, gustina raspodele verovatnoće[3.2.2] je $\rho(r, t) \stackrel{\text{def}}{=} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$, gde je $\psi(\mathbf{r}, t)$ rešenje Schrödinger-ove jednacine. Pokazati da se za slobodnu česticu može definisati i vektor gustine struje $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ tako da je (3.2.20) zadovoljeno. Da li se ovaj $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ uklapa u pojmovnu strukturu kvantne mehanike (kako smo je do sada upoznali)?

[3.2.1] U stvari „ravnim talasima" se obično nazivaju vektori $\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t_0) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{\imath}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}$, $\forall \mathbf{p}$. U njihovu definiciju ugrađena je najprostija fazna konvencija usklađena sa (2.9.2b). Ali možemo „ravnim talasima" nazivati i vektore $\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$, $t \geq t_0$, $\forall \mathbf{p}$, iz (3.2.19a), jer se tu radi samo o promeni faznog faktora (na to se svodi vremenska translacija stacionarnog stanja zbog konvencije (3.1.17b)).

[3.2.2] Istorijski se Postulat o verovatnoći prvi put pojavio baš u ovom obliku i dao ga je Max Born. I danas se interpretacija $|\psi|^2$ kao gustine raspodele verovatnoće nalaženja čestice često naziva *Born-ovim postulatom.*

3.3 Heisenberg-ova slika

Videli smo u teoriji reprezentovanja da se kvantno mehaničko opisivanje može slobodno seliti iz jednog prostora stanja u drugi, izomorfan, već prema potrebi i pogodnosti. U ovom odeljku ćemo naići na sličnu „pokretljivost" kvantne mehanike u kontekstu dinamičkog zakona. Uverićemo se da sadržaj odeljaka § 3.1 i § 3.2, što ćemo sad nazivati Schrödinger-ovom slikom, ima korisnu alternativnu mogućnost u tzv. Heisenberg-ovoj slici, kojoj je posvećen ovaj odeljak.

3.3.1 Slike uopšte i Schrödinger-ova slika

U teoriji reprezentovanja naučili smo veoma značajnu činjenicu da se kvantno mehaničko opisivanje fizičkih sistema ne menja prelaskom na izomorfan prostor stanja. Naravno, to važi i za izomorfizme prostora stanja koji ga preslikavaju na njega samog (tzv. automorfizme), što su, pošto se radi o Hilbert-ovom prostoru, unitarni operatori.

Pri vremenskoj evoluciji kvantnog sistema možemo u svakom trenutku t da primenimo neki unitarni operator $\hat{S}(t)$ istovremeno na vektore stanja i na opservable (kao $\hat{A} \to \hat{S}(t)\hat{A}\hat{S}(t)^{-1}$) i tako da pređemo na izomorfno opisivanje. Ono, kao što smo rekli, daje iste fizičke predikcije.

Zadatak 3.3.1 Objasniti na osnovu do sada naučenih Postulata kvantne mehanike zašto je kvantno mehaničko opisivanje fizičkih sistema invarijantno pri prelasku na izomorfan prostor ili pri prelasku automorfizmom na isti prostor.

Definisanje $\hat{S}(t)$ za $\forall t \geq t_0$ naziva se *slikom*. Najprostije je staviti $\hat{S}(t) = \hat{I}$, $\forall t \geq t_0$. Tako se dobija tzv. *Schrödinger-ova slika* zakona kretanja, a to je zapravo teorija koju smo proučavali u prethodna dva odeljka.

Ako se definiše $\hat{S}(t) = \hat{U}^{-1}(t - t_0, t_0) = \hat{U}^{\dagger}, \forall t \geq t_0$, dobija se tzv. *Heisenberg-ova slika.*

3.3.2 Prelazak na Heisenberg-ovu sliku

Sve vektore i operatore u Schrödinger-ovoj slici označićemo indeksom S, a u Heisenberg-ovoj slici isti entiteti imaće indeks H.

Pošto smo, pišući kratko $\hat{U}(t)$ umesto $\hat{U}(t-t_0, t_0)$, imali $\mid \psi_S(t)\,\rangle = \hat{U}(t) \mid \psi_S(t_0)\,\rangle$, sad imamo $\mid \psi_H(t)\,\rangle = \hat{U}^{-1}(t) \mid \psi_S(t)\,\rangle = \mid \psi_S(t_0)\,\rangle$. Dakle, usled $\hat{U}(t_0) = \hat{I}$,

$$\boxed{\mid \psi_H(t)\,\rangle = \mid \psi_H(t_0)\,\rangle = \mid \psi_S(t_0)\,\rangle}, \forall t \geq t_0, \tag{3.3.1}$$

tj. u Heisenberg-ovoj slici *vektor stanja se ne menja u toku vremena.* Drugim rečima, vektor stanja ψ_H pridružujemo celokupnoj vremenskoj evoluciji kvantnog ansambla.

U Schrödinger-ovoj slici su opservable, po pravilu, nezavisne od vremena, ali poneke mogu i da zavise od vremena (kao na primer hamiltonijan nekonzervativnog sistema). Ako izvršimo prelazak

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{A}_S(t)\hat{U}(t), \tag{3.3.2}$$

vidimo da se u Heisenberg-ovoj slici *opservable* po pravilu menjaju u toku vremena. U stvari u ovoj slici opservable nose teret *promene u vremenu* umesto da to čine stanja.

U slučaju konzervativnog kvantnog sistema, evolucioni operator je funkcija hamiltonijana $\hat{U}(t) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_S}$, te komutira sa njim ili ekvivalentno $\hat{U}^\dagger \hat{H}_S \hat{U} = \hat{H}_S$. Stoga

$$\hat{H}_H = \hat{H}_S, \tag{3.3.3}$$

što znači da ni $\hat{H}_H$ ne zavisi od vremena.

3.3.3 Zakon kretanja

Iz jednakosti (3.3.2) sledi $\hat{A}_H(t_0) = \hat{A}_S(t_0)$ (usled $\hat{U}(t_0) = \hat{I}$). Stoga, ako se ograničimo na *opservable koje u Schrödinger-ovoj slici ne zavise od vremena*: $\hat{A}_S(t) = \hat{A}_S(t_0)$, jednakost (3.3.2) može da se prepiše u vidu

$$\boxed{\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_H(t_0)\hat{U}(t)}. \tag{3.3.4}$$

To je *integralni vid dinamičkog zakona u Heisenberg-ovoj slici.*

Teorem 3.3.1 *Diferencijalni vid zakona kretanja u Heisenberg-ovoj slici glasi*

$$\boxed{\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{A}_H(t)}{\mathrm{d}t} = [\ \hat{A}_H(t), \hat{H}(t)\ ] + \imath\hbar\frac{\partial\hat{A}_H(t)}{\partial t}}, \tag{3.3.5a}$$

gde je

$$\frac{\partial\hat{A}_H(t)}{\partial t} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}^\dagger(t)\frac{\partial\hat{A}_S(t)}{\partial t}\hat{U}(t) \tag{3.3.5b}$$

i (3.3.5a) važi za svaku opservablu $\hat{A}_H$.

***Napomena* 3.3.1** Obratiti pažnju da parcijalni izvod po vremenu $\frac{\partial\hat{A}_H(t)}{\partial t}$ nije izvod operatora $\hat{A}_H(t)$, već transformacija sličnosti izvoda $\frac{\partial\hat{A}_S(t)}{\partial t}$ operatorom slike.

Dokaz: Pođimo od diferencirane jednakosti (3.3.2): $\frac{\mathrm{d}\hat{A}_H(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\hat{U}^\dagger(t)}{\mathrm{d}t}\hat{A}_S(t)\hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t)\frac{\partial\hat{A}_S(t)}{\partial t}\hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_S(t)\frac{\mathrm{d}\hat{U}(t)}{\mathrm{d}t}$. Pišemo $\frac{\partial\hat{A}_S(t)}{\partial t}$ umesto $\frac{\mathrm{d}\hat{A}_S(t)}{\mathrm{d}t}$ da bismo dopustili mogućnost da $\hat{A}_S(t)$ bude funkcija i drugih parametara (ili opservabli) pored t.
Podsetimo se diferencijalne jednačine (3.2.14) za evolucioni operator: $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}(t)}{\mathrm{d}t} = \hat{H}_S(t)\hat{U}(t)$. Adjungovanjem ove jednačine dobijamo $-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}^\dagger(t)}{\mathrm{d}t} = \hat{U}^\dagger(t)\hat{H}_S(t)$. Na osnovu poslednje dve jednakosti i definicije (3.3.5b) možemo jednakost iz prethodnog pasusa prepisati u vidu: $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{A}_H(t)}{\mathrm{d}t} = -\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}_S(t)\hat{A}_S(t)\hat{U}(t) + \imath\hbar\frac{\partial\hat{A}_H(t)}{\partial t} + \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_S(t)\hat{H}_S(t)\hat{U}(t)$. Ubacujući $\hat{I} = \hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t)$ između $\hat{H}_S$ i $\hat{A}_S$ itd. i koristeći se ponovo sa (3.3.2), na kraju imamo $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{A}_H(t)}{\mathrm{d}t} = -\hat{H}_H(t)\hat{A}_H(t) + \imath\hbar\frac{\partial\hat{A}_H(t)}{\partial t} + \hat{A}_H(t)\hat{H}_H(t)$. *Q. E. D.*

3.3.4 Verovatnoća prelaza iz jednog stanja u drugo

Vratimo se za trenutak na Schrödinger-ovu sliku i podsetimo se na pojam prelaza (merenjem) iz stanja ψ u stanje φ (§ 2.4.7): neka je $\hat{A}_{S1}, \hat{A}_{S2}, \ldots \hat{A}_{SK}$ potpuni skup kompatibilnih opservabli, $a_1, a_2, \ldots, a_K$ skup odgovarajućih svojstvenih vrednosti,a $|\ \varphi_S\ \rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\ a_1, a_2, \ldots, a_K\ \rangle$ zajednički svojstveni vektor. Neka je sistem u trenutku t u stanju $|\ \psi_S(t)\ \rangle = \hat{U}(t)\ |\ \psi_S(t_0)\ \rangle$, a mi na njemu

vršimo istovremeno merenje opservabli $\hat{A}_{S1}, \hat{A}_{S2}, \dots \hat{A}_{SK}$ Verovatnoća da sistem pređe u stanje $|\,\varphi_S\,\rangle$, tj da merenje da rezultate $a_1, a_2, \dots, a_K$, glasi $v(\psi_S \to \varphi_{S,t}) = |\langle\,\varphi_S \mid \psi_S(t)\rangle|^2$ (2.4.8).

Pitamo se kako se prelaz $\psi_S \to \varphi_S$ opisuje u Heisenberg-ovoj slici. U ovoj slici stanje kvantnog sistema izražava se vektorom $|\,\psi_H\,\rangle = |\,\psi_S(t_0)\,\rangle$ i u trenutku t, ali zato je vektor $|\,\varphi_H\,\rangle$, koji odgovara određenom rezultatu merenja, zavisan od vremena. Naime, imamo $\hat{A}_{H1} = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_{S1}\hat{U}(t), \dots, \hat{A}_{HK} = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_{SK}\hat{U}(t)$, a to, kao što je poznato iz teorije operatora u Hilbert-ovim prostorima, uopšte ne menja svojstvene vrednosti $a_1, \dots, a_K$, ali menja zajedničke svojstvene vektore (sve ovo je očigledno u spektralnoj formi operatora). Zajedničko svojstveno stanje je sad $|\,\varphi_H\,\rangle = \hat{U}^\dagger(t)\,|\,\varphi_S\,\rangle$, ili na jeziku braova[3.3.1]: $\langle\varphi_H\,| = \langle\varphi_S\mid\hat{U}(t)$. Stoga

$$v(\psi_H \to \varphi_{H,t}) = |\langle\,\varphi_H(t) \mid \psi_H\rangle|^2 = |\langle\varphi_S \mid \hat{U}(t) \mid \psi_S(t_0)\,\rangle|^2 = v(\psi_S \to \varphi_{S,t}). \tag{3.3.6}$$

Kao što vidimo, verovatnoća prelaza ima, na kraju, isti vid kao u Schrödinger-ovoj slici. To smo, naravno i očekivali.

3.3.5 Upoređivanje slika

U gotovo svim primenama kvantne mehanike Schrödinger-ova slika ima izrazitu prednost nad Heisenberg-ovom slikom, iz prostog razloga što je lakše izračunati efekt vremenske evolucije na vektor nego na operator. Naime, operator je kompleksniji objekat, na primer u reprezentaciji operator je kvadratna matrica, a vektor je brojna kolona. Zato se vremenska evolucija obično detaljno izlaže u Schrödinger-ovoj slici, kao što smo i mi uradili.

S druge strane, Heisenberg-ova slika ima često prednost nad Schrödinger-ovom slikom kada se radi o nekom teorijskom pitanju. Najvažniji primeri su sledeći:

a) poređenje kvantne mehanike sa klasičnom mehanikom;

b) izučavanje konstanti kretanja i dobrih kvantnih brojeva u kvantnoj mehanici;

c) kvantizacija elektromagnetnog polja.

Mi ćemo konstante kretanja i dobre kvantne brojeve ipak izložiti u Schrödinger-ovoj slici (radi boljeg uklapanja u kontekst) u § 8.3.7, ali u zadacima ćemo ukazati na prednosti Heisenberg-ove slike. Poređenju kvantne mehanike sa klasičnom posvetićemo sledeći paragraf.

3.3.6 Poređenje sa klasičnom mehanikom

Neka je naš kvantni sistem jedna čestica, a njen prostor stanja $\mathcal{H}_o$. Primenimo zakon kretanja u diferencijalnom vidu (3.3.5a) na osnovni skup opservabli $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$:

$$\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{r}}}{\mathrm{d}t} = [\,\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_H(t)\,], \tag{3.3.7a}$$

[3.3.1] Podsetimo se da ket-bra dualizam $\hat{D}_a$ (antilinearan je) deluje, kao i svako biunivoko preslikavanje, na sledeći način: $\langle\varphi_H\,| \stackrel{\text{def}}{=} \hat{D}_a\,|\,\varphi_H\,\rangle = (\hat{D}_a\hat{U}^\dagger(t)\hat{D}_a^{-1})(\hat{D}_a\,|\,\varphi_S\rangle) = \langle\varphi_S\mid\hat{U}(t)$, jer, po konvenciji, u prostoru braova operatori deluju zdesna na levo, a ekvivalentni operator po dualizmu (tj. $\hat{D}_a \dots \hat{D}_a^{-1}$) je adjungovani operator (u prostoru ketova) koji deluje nalevo, tj. na braove.

$$\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{p}}}{\mathrm{d}t} = [\ \hat{\mathbf{p}}, \hat{H}_H(t)\ ] \tag{3.3.7b}$$

(i (3.3.7a) i (3.3.7b) su po tri jednakosti, jer $\hat{\mathbf{r}} \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ itd.), gde smo na $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ izostavili indeks H.

Iz (2.6.7) znamo da je $\mathcal{H}_o = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$ — što je kvantno mehaničko uvođenje x, y, z-stepena slobode čestice, a u $\mathcal{H}_x$ videli smo da važe jednakosti (2.5.11):

$$[\ \hat{x}, \hat{A}\ ] = \imath\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{p}_x}, \quad [\ \hat{p}_x, \hat{A}\ ] = -\imath\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{x}}, \tag{3.3.8a,b}$$

za proizvoljnu analitičku operatorsku funkciju $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p}_x)$ u $\mathcal{H}_x$. Iz dokaza ovih rezultata možemo se lako uveriti da relacije (3.3.8) važe i u $\mathcal{H}_o$ za svaku analitičku funkciju $\hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$ ako $\hat{x}$ iz $\mathcal{H}_x$ postaje $\hat{x} \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{I}_z$ u $\mathcal{H}_o$ itd. Potpuno analogne jednakosti važe u $\mathcal{H}_y$ i $\mathcal{H}_z$ i analogno se otud mogu preneti u $\mathcal{H}_o$. Dakle, u $\mathcal{H}_o$ imamo jednakosti:

$$[\ \hat{\mathbf{r}}, \hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})\ ] = \imath\hbar\frac{\partial\hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})}{\partial\hat{\mathbf{p}}}, \tag{3.3.9a}$$

$$[\ \hat{\mathbf{p}}, \hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})\ ] = -\imath\hbar\frac{\partial\hat{A}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})}{\partial\hat{\mathbf{r}}}. \tag{3.3.9b}$$

Pod pretpostavkom da je u trenutku t, hamiltonijan $\hat{H}_H(t)$ analitička funkcija od $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$, (3.3.7) i (3.3.9) odmah daju:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{r}}_H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\hat{H}_H(t)}{\partial\hat{\mathbf{p}}_H} \tag{3.3.10a}$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{p}}_H}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial\hat{H}_H(t)}{\partial\hat{\mathbf{r}}_H}. \tag{3.3.10b}$$

U (3.3.10) prepoznajemo analogone poznatih Hamilton-ovih jednačina kretanja klasične čestice.

Striktna analogija između klasične mehanike i kvantne mehanike u Heisenberg-ovoj slici može se još upotpuniti ako se podsetimo da u klasičnoj fizici proizvoljna varijabla A zadovoljava sledeći zakon kretanja

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = [\ A, H\ ]_{PZ} + \frac{\partial A}{\partial t}, \tag{3.3.11}$$

gde je H klasična hamiltonova funkcija sistema.

Upoređenje (3.3.11) i (3.3.5a) dovodi do zaključka da se (3.3.5a) može dobiti iz (3.3.11) zamenom klasičnih varijabli kvantno mehaničkim opservablama i pisanjem komutatora pomnoženog sa $-\frac{\imath}{\hbar}$ na mesto Poisson-ove zagrade, baš kao što smo i do sada postupali po Postulatu o kvantizaciji.

3.3.7 Alternativna mogućnost za Dirac-ov postulat o zakonu kretanja

Značaj zaključka kojim smo završili prethodni paragraf je u tome što mi nismo (3.3.5a) dobili kvantizacijom jednakosti (3.3.11), već smo (3.3.5a) izveli sledeći Dirac-ovu intuiciju izraženu preko našeg Postulata o zakonu kretanja. Nameću se dva zaključka:

1. U odeljku § 3.1 prepoznali smo $\hat{H}(t)$ kao hamiltonijan, ali to se dešavalo pomalo intuitivno i nedovoljno konkluzivno (videti 3.1.4). Tek sada možemo smatrati dokazanim da je naš zaključak bio ispravan.

2. Moglo bi se reći da je Dirac-ov Postulat o zakonu kretanja u § 3.1 nepotreban, dovoljno je samo proširiti postupak kvantizacije na vremensku evoluciju. Onda bismo prvo dobili Heisenberg-ovu sliku, pa bismo sa nje prešli na Schrödinger-ovu sliku. Čovek sa prvenstveno logičko-aksiomatsko-matematičkim inklinacijama bi bez sumnje izabrao ovaj metodološki elegantniji pristup zakonu kretanja u kvantnoj mehanici. Ali u fizici ipak na prvo mesto treba staviti intuitivno poimanje fizičkog sadržaja, a u tom pogledu Dirac-ov put je mnogo superiorniji, kao što se, nadamo se, čitalac mogao uveriti[3.3.2]

3.3.8 Zakon kretanja za srednje vrednosti

Uzimajući očekivanu vrednost $\langle\psi_H \mid \ldots \mid \psi_H\rangle$ (i obeležavajući je kratko sa $\langle \ldots \rangle$) od operatorske jednakosti (3.3.5a) dolazimo do tzv. *zakona kretanja za srednje vrednosti*:

$$\frac{\mathrm{d}\langle \hat{A}_H(t) \rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{\imath}{\hbar}\langle [\, \hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t) \,] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}_H(t)}{\partial t} \rangle. \tag{3.3.12}$$

Upoređivanje ovog zakona sa (3.3.11) je možda još više impresivno u smislu iznenađujuće analogije, nego upoređivanje (3.3.5a) sa (3.3.11), jer u (3.3.12) se radi o brojevima.

Zadatak 3.3.2 a) Staviti $\hat{A}_H(t) = \hat{\mathbf{r}}_H(t)$ i $\hat{A}_H(t) = \hat{\mathbf{p}}_H(t)$ u (3.3.12) i pomoću (3.3.9) izvesti tzv. *Ehrenfest-ove jednakosti*:

$$\frac{\mathrm{d}\langle \hat{\mathbf{r}}_H \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle \frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{\mathbf{p}}_H} \rangle, \quad \frac{\mathrm{d}\langle \hat{\mathbf{p}}_H \rangle}{\mathrm{d}t} = -\langle \frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{\mathbf{r}}_H} \rangle. \tag{3.3.13a,b}$$

b) Pokazati da se u slučaju $\hat{H}_H(t) = \frac{\hat{\mathbf{p}}_H^2(t)}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}_H(t))$ (3.3.13b) svodi na: $\frac{\mathrm{d}\langle \hat{\mathbf{p}}_H \rangle}{\mathrm{d}t} = \langle -\mathrm{grad}\, \hat{V}_H \rangle$.

Zadatak 3.3.3 Prerepisati (3.3.12) u Schrödinger-ovoj slici imajući u vidu da su svi brojevi (kao srednje vrednosti) koji proističu iz kvantno mehaničkog opisivanja sistema invarijante svakog izomorfnog preslikavanja.

3.4 Interakciona slika i interna konverzija

Kvantna mehanika ima jednu ozbiljnu slabost u praksi: svojstveni problem hamiltonijana većine realnih kvantnih sistema ne može tačno da se reši. U ovom odeljku ćemo naučiti kako kvantna mehanika ovu slabost pretvara u prednost, u jedno specijalno viđenje kvantnog mehanizma nekih fizičkih pojava.

Upoznaćemo se preliminarno sa pojmovima neperturbovanog hamiltonijana, perturbacije i perturbovanog hamiltonijana i, na osnovu toga, izučićemo jednu novu sliku, tzv. *interakcionu*

[3.3.2] Čitaocu je verovatno jasno da trnoviti put koji smo prešli u Dirac-ovom prilazu (niz pojačanja opštih pretpostavki iz Postulata VI, nagađanja itd.) postoji i u pomenutoj drugoj mogućnosti prilaza. Samo što bi tu sve bilo implicitno, sakriveno u klasičnim relacijama.

Dirac-ov pristup ima poseban značaj za kvantne sisteme bez potpunog (ili bez ikakvog) klasičnog analogona.

sliku. Ona je prilagođena primeni na kvantne sisteme čiji se hamiltonijan prirodno piše kao perturbovani hamiltonijan.

Kratko ćemo prodiskutovati kvalitativnu primenu formule verovatnoće prelaza u interakcionoj slici na nekoliko osnovnih kvantnih fenomena. Završićemo odeljak diskusijom začuđujućeg fenomena da su sva pobuđena stanja svih kvantnih sistema nestabilna.

3.4.1 Perturbacija

Za mnoge kvantne sisteme hamiltonijan $\hat{H}(t)$ je toliko složen da njegov svojstveni problem ne možemo neposredno da rešimo. Ali često možemo da ga napišemo kao zbir dva člana

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0(t) + \hat{H}'(t), \tag{3.4.1}$$

tako da a) svojstveni problem od $\hat{H}_0(t)$ znamo da rešimo, b) $\hat{H}'(t)$ je „mali" operator, tj. u proizvoljnom bazisu $\{|\, n\,\rangle | \forall n\}$ svi matrični elementi $\langle n \mid \hat{H}'(t) \mid n\,\rangle$ su mali, drugim rečima, po modulu mnogo manji od jedinice.

$\hat{H}_0(t)$ se naziva hamiltonijanom neperturbovanog sistema ili *neperturbovanim hamiltonijanom*; $\hat{H}'(t)$ se naziva *perturbacijom*, a o celom $\hat{H}(t)$ se govori kao o hamiltonijanu perturbovanog sistema ili o *perturbovanom hamiltonijanu.*

Hamiltonijan kvantnog sistema izražava, kao što znamo, fizičku strukturu sistema. Kada se radi o perturbovanom hamiltonijanu, onda neperturbovani deo izražava dominantni deo strukture, a perturbacija unosi malu korekciju. Zbog prisustva ove korekcije (ako je $[\, \hat{H}_0(y), \hat{H}'(t)\,] \neq 0$) obično ne umemo da rešimo svojstveni problem od $\hat{H}(t)$.

3.4.2 Interakciona slika

Pretpostavimo da neperturbovani hamiltonijan $\hat{H}_0(t)$ definiše evolucioni operator $\hat{U}_0(t-t_0, t_0)$, tj. da $\hat{U}_0(t-t_0, t_0)$ zadovoljava

$$\imath\hbar \frac{\mathrm{d}\hat{U}_0(t-t_0,t_0)}{\mathrm{d}t} = \hat{H}_0(t)\hat{U}_0(t-t_0,t_0), \quad \hat{U}_0(0,t_0) = \hat{I} \tag{3.4.2a,b}$$

(uporediti (3.1.14)).

U tzv. *interakcionoj slici* zakona kretanja imamo po definiciji

$$\hat{S}(t) \overset{\mathrm{def}}{=} \hat{U}^\dagger(t-t_0,t_0) = \hat{U}_0^{-1} \tag{3.4.3}$$

(videti u § 3.3.1 pojam operatora slike $\hat{S}(t)$). Drugim rečima, *interakciona slika je Heisenberg-ova slika u odnosu na neperturbovani hamiltonijan.* Termin „interakciona" dolazi otud što perturbacija $\hat{H}'(t)$ obično potiče od interakcije čestica. Ponekad se ova slika naziva i Dirac-ovom.

Pošto se kvantni sistem o kojem je reč opisuje perturbovanim hamiltonijanom, moramo povesti računa i o perturbaciji.

Neka je $\hat{U}(t-t_0, t_0)$ tačni evolucioni operator sistema, tj. evolucioni operator koji definiše perturbovani hamiltonijan:

$$\imath\hbar \frac{\mathrm{d}\hat{U}(t-t_0,t_0)}{\mathrm{d}t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t-t_0,t_0), \quad \hat{U}(0,to) = \hat{I}. \tag{3.4.4a,b}$$

Izvršimo faktorizaciju

$$\hat{U}(t-t_0,t_0) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}_0(t-t_0,t_0)\hat{U}'(t-t_0,t_0) \tag{3.4.5}$$

(definicija za $\hat{U}'$), sa namerom da $\hat{U}'$ povežemo sa perturbacijom $\hat{H}'(t)$.

3.4.3 Perturbacioni evolucioni operator $\hat{U}'$

Teorem 3.4.1 *Operatori $\hat{U}'$ i $\hat{H}'$ su uzajamno povezani diferencijalnom jednačinom*

$$\boxed{\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}'(t-t_0,t_0)}{\mathrm{d}t} = \hat{H}'_I(t)\hat{U}'(t-t_0,t_0)}, \quad \hat{U}'(0,t_0)=\hat{I}, \tag{3.4.6a,b}$$

gde je $\hat{H}_I(t)$ perturbacija u interakcionoj slici:

$$\hat{H}'_I(t) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}_0^\dagger(t-t_0,t_0)\hat{H}'(t)\hat{U}_0(t-t_0,t_0). \tag{3.4.6c}$$

Dokaz: Pođimo od (3.4.4a) i zamenimo u njoj (3.4.5) i (3.4.1): $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}_0}{\mathrm{d}t}\hat{U}'+\imath\hbar\hat{U}_0\frac{\mathrm{d}\hat{U}'}{\mathrm{d}t} = (\hat{H}_0+\hat{H}')\hat{U}_0\hat{U}'$. Zamenimo na LS-i $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}_0}{\mathrm{d}t}$ iz (3.4.2a) i skratimo posle toga jednake članove na LS-i i DS-i. Tako dolazimo do $\imath\hbar\hat{U}_0\frac{\mathrm{d}\hat{U}'}{\mathrm{d}t} = \hat{H}'\hat{U}_0\hat{U}'$. Kada ovu jednakost pomnožimo sa LS-e sa $\hat{U}_0^\dagger$, dobijamo (3.4.6a) sa (3.4.6c). A (3.4.6b) odmah sledi iz (3.4.5), (3.4.2b) i (3.4.4b). *Q. E. D.*

***Napomena* 3.4.1** Treba uočiti da su diferencijalne jednačine za evolucione operatore $\hat{U}_0$ i $\hat{U}'$ (3.4.2a) odnosno (3.4.6a) samo prividno raspregnute, tj. nezavisne jedna od druge. Naime, dok (3.4.2a) stvarno ne zavisi od perturbacije, (3.4.6a) zavisi od neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$ (preko $\hat{U}_0$ u (3.4.6c).

Pošto je vektor stanja u Schrödinger-ovoj slici $\mid \psi_S(t)\rangle = \hat{U} \mid \psi_S(t_0)\rangle = \hat{U}_0\hat{U}' \mid \psi_S(t_0)\rangle$, a vektor stanja u interakcionoj slici je po definiciji $\mid \psi_I(t)\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{S}(t) \mid \psi_S(t)\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}_0^{-1} \mid \psi_S(t)\rangle$, očigledno imamo

$$\boxed{\mid \psi_I(t)\rangle = \hat{U}'(t-t_0,t_0) \mid \psi_I(t_0)\rangle = \hat{U}'(t-t_0,t_0) \mid \psi_S(t_0)\rangle}. \tag{3.4.7a}$$

Iskoristili smo i

$$\mid \psi_I(t_0)\rangle = \mid \psi_S(t_0)\rangle, \tag{3.4.7b}$$

što odmah sledi iz $\hat{S}(t_0) = \hat{U}_0^{-1}(0,t_0) = \hat{I}$.

Da rezimiramo, evolucija sistema se razlaže na neperturbovanu, koja deluje na opservable, a na tom "fonu" je izdvojena evolucija stanja izražena perturbacionim evolucionim operatorom U'.

3.4.4 Vremenska evolucija opservabli

Vratimo se za trenutak na neperturbovani hamiltonijan $\hat{H}_0$ i njegov evolucioni operator $\hat{U}_0$. Zapitajmo se u čemu je fizički smisao operatora $\hat{H}_0$ i $\hat{U}_0$.

Teorem 3.4.2 *Proizvoljna opservabla $\hat{A}$ u interakcionoj slici — pisaćemo je A_I — menja se u vremenu po sledećem diferencijalnom zakonu kretanja:*

$$\boxed{\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{A}_I(t)}{\mathrm{d}t} = [\ \hat{A}_I(t), \hat{H}_I^{(0)}(t)\ ] + \imath\hbar\frac{\partial\hat{A}_I(t)}{\partial t}}, \tag{3.4.8a}$$

gde je

$$\hat{H}_I^{(0)}(t) \overset{\text{def}}{=} \hat{U}_0^\dagger(t-t_0,t_0)\hat{H}_0(t)\hat{U}_0(t-t_0,t_0) \qquad (3.4.8b)$$

neperturbovani hamiltonijan u interakcionoj slici, a

$$\frac{\partial \hat{A}_I(t)}{\partial t} \overset{\text{def}}{=} \hat{U}_0^\dagger \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t}\hat{U}_0. \qquad (3.4.8c)$$

Dokaz: Pođimo, kao i u dokazu analognog teorema T 3.3.1, od definicije $\hat{A}_I(t) \overset{\text{def}}{=} \hat{U}_0^\dagger \hat{A}_S \hat{U}_0$ i diferencirajmo je po vremenu: $\frac{\mathrm{d}\hat{A}_I(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\hat{U}_0^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{A}_S\hat{U}_0 + \hat{U}_0^\dagger \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t}\hat{U}_0 + \hat{U}_0^\dagger \hat{A}_S \frac{\mathrm{d}\hat{U}_0}{\mathrm{d}t}$. Koristeći se sa (3.4.2$a$), imamo $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{A}_I(t)}{\mathrm{d}t} = -\hat{U}_0^\dagger \hat{H}_0 \hat{A}_S \hat{U}_0 + \imath\hbar\frac{\partial \hat{A}_I}{\partial t} + \hat{U}_0^\dagger \hat{A}_S \hat{H}_0 \hat{U}_0$, što daje (3.4.8$a$). *Q. E. D.*

***Napomena* 3.4.2** Ako neperturbovani hamiltonijan opisuje konzervativni sistem, onda se (3.4.8b) svodi na

$$\hat{H}_I^{(0)} = \hat{H}_0, \qquad (3.4.9)$$

jer je $\hat{U}_0 = e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0}$.

Dakle, kao što sledi iz (3.4.8), $\hat{H}_0(t)$ reguliše zakon kretanja opservabli. Operator evolucije $\hat{U}_0$ daje odgovarajući integralni vid zakona kretanja za opservable koje u Schrödinger-ovoj slici ne zavise od vremena:

$$\boxed{\hat{A}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t-t_0,t_0)\hat{A}_I(t_0)\hat{U}_0(t-t_0,t_0)} \qquad (3.4.10)$$

((3.4.10) u stvari transformiše opservable iz Schrödinger-ove u interakcionu sliku, a $\hat{A}_S(t) = \hat{A}_S(t_0) = \hat{A}_I(t_0)$). U tome je fizički smisao entiteta $\hat{H}_0(t)$ i $\hat{U}_0(t-t_0,t_0)$.

U interakcionoj slici, kao što vidimo, menjaju se u vremenu i opservable (slično kao u Heisenberg-ovoj slici) i vektori stanja (slično kao u Schrödinger-ovoj slici). U tom pogledu interakciona slika je između Heisenberg-ove i Schrödinger-ove slike i zato se naziva i *intermedijernom slikom.*

3.4.5 Verovatnoća prelaza

Napišimo verovatnoću prelaza u interakcionoj slici:

$$v(\psi_I \to \varphi_I, t) = |\langle\, \psi_I(t) \mid \varphi_I(t)\rangle|^2, \qquad (3.4.11a)$$

gde je

$$\mid \psi_I(t)\,\rangle = \hat{U}'(t-t_0,t_0) \mid \psi_I(t_0)\,\rangle, \qquad (3.4.11b)$$

a

$$\mid \varphi_I(t)\,\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t-t_0,t_0) \mid \varphi_I(t_0)\,\rangle, \qquad (3.4.11c)$$

jer je ψ vektor stanja, a φ u suštini rezultat merenja[3.4.1], tj. $\hat{A}\varphi = a\varphi \Rightarrow (\hat{U}_0^\dagger \hat{A}\hat{U}_0)(\hat{U}_0^\dagger\varphi) = a(\hat{U}_0^\dagger\varphi)$ $\Rightarrow \hat{A}_I\varphi_I = a\varphi_I$ (uporediti (3.3.6) i (2.4.8)).

Naravno, na jeziku braova (3.4.11c) ima vid

$$\langle\varphi_I(t) \mid = \langle\varphi_I(t_0) \mid \hat{U}_0(t-t_0,t_0). \qquad (3.4.11d)$$

[3.4.1]Stanje φ se često naziva krajnjim stanjem (engleski: *final state*, čitati: fajnl stejt), jer se posle (selektivnog) merenja kvantni sistem nađe u tom stanju; slično, ψ se obično naziva početnim stanjem (egleski: *initial state*, čitati: inišl stejt).

Zadatak 3.4.1 Pokazati da $v(\psi_I \to \varphi_I, t) = v(\psi_S \to \varphi_{S,t})$.

Učinimo sad sledeće pretpostavke:

a) neperturbovani hamiltonijan ne zavisi od vremena;

b) početno stanje $|\,\psi_I(t_0)\,\rangle$ je svojstveno stanje neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$, pisaćemo $|\,n_0\,\rangle \stackrel{\mathrm{def}}{=} |\,\psi_I(t_0)\,\rangle$ i

c) u trenutku $t \geq t_0$ vršimo merenje opservable $\hat{H}_0$ i pitamo se kakva je verovatnoća da dobijemo rezultat E_n koji je rešenje svojstvenog problema[3.4.2]

$$\hat{H}_0 \mid n\,\rangle = E_n \mid n\,\rangle. \tag{3.4.12}$$

U ovom specijalnom slučaju imamo $|\,\psi_I(t)\,\rangle = \hat{U}'(t-t_0, t_0) \mid n_0\,\rangle$, $|\,\varphi_I(t)\,\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} \mid n\,\rangle$ i

$$\boxed{v(|\,n_0\,\rangle \to |\,n\,\rangle, t) = |\langle n \mid \hat{U}'(t-t_0, t_0) \mid n_0\,\rangle|^2} \tag{3.4.13}$$

(zbog uzimanja modula ispustili smo fazni faktor uz $\langle n\,|$).

Za izračunavanje verovatnoće prelaza (3.4.13) potrebno je prethodno izračunati $\hat{U}'$. Pošto je diferencijalna jednačina preko koje perturbacija $\hat{H}_I(t)$ definiše $\hat{U}'$, tj. (3.4.6a), analogna diferencijalnoj jednačini u kojoj hamiltonijan definiše evolucioni operator u Schrödinger-ovoj slici (videti (3.1.14)) i ovde možemo preći na ekvivalentnu integralnu jednačinu (analogon od (3.1.15)) i tražiti iteraciono rešenje preko Dyson-ovog reda (uporediti § 3.1.7).

Sada ćemo poći induktivno, preko konkretnih fenomena, ka kvalitativnoj interpretaciji formule (3.4.13) (u paragrafu § 3.4.9), koja je od značaja za razumevanje nekih kvantnih pojava.

3.4.6 Interna konverzija u atomskoj fizici

Pretpostavimo da je kvantni sistem koji posmatramo *elektronski omotač neutralnog helijumovog atoma.* Neperturbovani hamiltonijan onda možemo da napišemo u obliku

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2}, \tag{3.4.14}$$

gde je m_e masa elektrona, a e električni naboj protona. Očigledno, (3.4.14) je napisano u radijus-vektorskoj reprezentaciji, tj. $\hat{H}_0$ deluje u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.

Naš neperturbovani sistem je fiktivan, jer u njemu elektroni ne interaguju; očigledno je konzervativan, ali neizolovan (nalazi se u spoljašnjem Coulomb-ovom polju jezgra).

Perturbacija $\hat{H}'$ je uzajamna interakcija elektrona

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \tag{3.4.15}$$

[3.4.2] Pažljivi čitalac primećuje da prećutno pretpostavljamo da je $|\,n\rangle$ definisan sa E_n. Dakle, ili je neperturbovani nivo E_n nedegenerisan, ili smo $\hat{H}_0$ već dopunili do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli.

Elektronski omotač je u stvari opisan perturbovanim hamiltonijanom $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ i sistem je konzervativan.

U neperturbovanom hamiltonijanu (3.4.14) dva elektrona su, kao što se kaže *dinamički nezavisna*. To će reći da možemo da napišemo $\hat{H}_0 = \hat{H}_1^{(0)} + \hat{H}_2^{(0)}$, gde $\hat{H}_1^{(0)}$ zavisi samo od opservabli prvog elektrona (tj. deluje u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1)$) a $\hat{H}_2^{(0)}$ zavisi samo od opservabli drugog elektrona (tj. deluje u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_2)$). Osim toga, $\hat{H}_1^{(0)} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{r_1}$ i $\hat{H}_2^{(0)} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{r_2}$ su jednake operatorske funkcije osnovnog skupa opservabli.

U ovakvom slučaju tzv. *modela nezavisnih čestica* dovoljno je rešiti svojstveni problem recimo za $\hat{H}_1^{(0)}$, a rešenja za $\hat{H}_2^{(0)}$ onda možemo da napišemo po analogiji; dvoelektronski energetski nivo je zbir jednoelektronskih, a dvoelektronsko stanje proizvod jednoelektronskih stanja:

$$E_{12}^{(n_1,n_2)} = E_1^{(n_1)} + E_2^{(n_2)}, \quad \mid n_1, n_2 \rangle = \mid n_1 \rangle \otimes \mid n_2 \rangle. \qquad (3.4.16a,b)$$

Ovde se, naravno, radi o rešenjima svojstvenih problema

$$\hat{H}_0 \mid n_1, n_2 \rangle = E_{12}^{(n_1,n_2)} \mid n_1, n_2 \rangle, \quad \hat{H}_1^{(0)} \mid n_1 \rangle = E_1^{(n_1)} \mid n_1 \rangle, \quad \hat{H}_2^{(0)} \mid n_2 \rangle = E_2^{(n_2)} \mid n_2 \rangle. \quad (3.4.17a,b,c)$$

Zadatak 3.4.2 Interpretirajući (3.4.16) kao definicije LS-a, pokazati da (3.4.17*a*) neposredno sledi iz (3.4.17*b*, 3.4.17*c*).

Tek ćemo u odeljku § 9.1 rešiti svojstveni problem elektrona u polju vodoniku sličnog jezgra i dobiti jednočestične energetske nivoe $E_1^{(n_1)}$ (ili $E_2^{(n_2)}$). Ispostaviće se da je n_1 u stvari niz od tri kvantna broja (ako zanemarimo spin), pri čemu energetski nivo zavisi samo od tzv. glavnog kvantnog broja, koji uzima vrednosti 1,2,..., i od kvantnog broja orbitnog uglovnog momenta, čije se vrednosti pišu $s, p, d, \ldots$ Ova dva kvantna broja pišu se zajedno kao $1s, 2s, \ldots$ itd.

Diskretni spektar od $\hat{H}_1^{(0)}$ sadržavaće nivoe *vezanih stanja* elektrona; a pored toga imaćemo i kontinualni spektar dat intervalom energija $[0, +\infty)$. Energetske vrednosti iz kontinualnog spektra odgovaraće *nevezanom elektronu* (omotač je onda jonizovan), koji je praktično van domašaja potencijala jezgra, a njegova kinetička energija može imati bilo koju nenegativnu vrednost.

Neka je početno stanje $\mid \psi_I(t_0) \rangle = \mid n_1^0, n_2^0 \rangle$ dvoelektronskog omotača svojstveno stanje neperturbovanog hamiltonijana $\hat{H}_0$ iz (3.4.14) i to takvo da su oba elektrona u ekscitiranom $2s$ stanju. Neka jednaku dvoelektronsku energiju (što se tiče $\hat{H}_0$) ima jedno drugo stanje $\mid n_1, n_2 \rangle$ u kojem je jedan od elektrona u osnovnom stanju $1s$, a drugi elektron je slobodan (sa pogodnom vrednošću kinetičke energije). Pošto se radi o istoj energiji, pitamo se ne bi li sistem mogao da pređe bez apsorbcije ili emisije energije iz početnog stanja $\mid n_1^0, n_2^0 \rangle$ u pomenuto stanje $\mid n_1, n_2 \rangle$.

Kvantno mehanički odgovor na naše pitanje daje upravo formula (3.4.13) za verovatnoću prelaza (očigledno su uslovi a)-c) zadovoljeni). Usled postojanja perturbacije $\hat{H}'$, $\hat{U}' \neq \hat{I}$, verovatnoća je $v(\mid n_1^0, n_2^0 \rangle \to \mid n_1, n_2 \rangle) > 0$ (nećemo sad izračunavati njenu vrednost).

Pomenuti spontani prelaz $\mid n_1^0, n_2^0 \rangle \to \mid n_1, n_2 \rangle$ poznat je u eksperimentima i naziva se *internom konverzijom*, pošto se jedno stanje konvertuje u drugo. Kao sinonimi pojavljuju se nazivi: *bezradijacioni ili autojonizujući ili Auger-ov* (čitati: Ožeov) *efekat*. Oslobođeni elektron se naziva *Auger-ovim elektronom*.

Auger je ovaj efekat posmatrao u Wilson-ovoj komori. Ozračivao je kripton rendgenskim zracima i video trag fotoelektrona iz K-ljuske, koja odgovara osnovnom stanju $\mid n_1 = 1s \rangle$, dakle najjače vezanom elektronu. Međutim, povremeno bi video i dva traga iz iste tačke. Drugi elektron

je bio Auger-ov elektron. Energija vezivanja[3.4.3] elektrona u K-ljusci je preko dva puta veća od energije vezivanja u L-ljusci: $E_K > 2E_L$. Izbijanjem elektrona iz K-ljuske omotač ima energiju ekscitacije E_K. Autojonizacijom dva elektrona se otrgnu iz L-ljuske, jedan popuni prazninu u K-ljusci, a drugi izleti iz omotača (kao Auger-ov elektron) sa kinetičkom energijom $E_K - 2E_L$. Omotač ostane sa energijom ekscitacije $2E_L$, pa se deekscituje sekundarnim zračenjem.

3.4.7 Interna konverzija u nuklearnoj fizici

Pojava slična opisanoj u prethodnom paragrafu se ponekad može posmatrati i pri dovoljno velikoj ekscitaciji atomskog jezgra. Deekscitacija se ostvaruje emisijom elektrona iz elektronskog omotača. I ovo je proces interne konverzije. Postavlja se pitanje kako treba razumeti ovaj proces u interakcionoj slici preko verovatnoće prelaza (3.4.13).

Neka je perturbovani hamiltonijan $\hat{H}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \hat{H}_J + \hat{H}_E$, gde je $\hat{H}_J$ hamiltonijan jezgra, a $\hat{H}_E$ hamiltonijan elektronskog omotača. Oba ova hamiltonijana su ukupna u smislu da $\hat{H}_J$ egzaktno opisuje golo jezgro, a $\hat{H}_E$ opisuje omotač sa interagujućim elektronima u spoljašnjem polju jezgra.

Neka je perturbacija $\hat{H}'$ polje kojim elektronski omotač deluje na jezgro (ono je malo, ali po principu akcije i reakcije, koji se održava kvantizacijom, mora da postoji). Početno stanje $\mid n_0 \rangle$ celog atoma je svojstveno stanje od $\hat{H}_0$ u kojem je jezgro pobuđeno, a elektronski omotač je u osnovnom stanju. Krajnje stanje $\mid n \rangle$ atoma je takođe svojstveno stanje od $\hat{H}_0$ i to sa istom svojstvenom vrednošću E_{12}, ali u njemu je jezgro u osnovnom stanju, a omotač je u pobuđenom stanju i to jonizovan sa jednim emitovanim elektronom. Kao što formula (3.4.13) pokazuje, usled postojanja perturbacije $\hat{H}'$ i odgovarajućeg perturbacionog evolucionog operatora $\hat{U}' \neq \hat{I}$, postoji pozitivna verovatnoća prelaza $\mid n_0 \rangle \rightarrow \mid n \rangle$ (bez razmene energije sa okolinom).

3.4.8 Elastično rasejanje

Neka je neperturbovani hamiltonijan $\hat{H}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$ operator kinetičke energije slobodne čestice, a neka je perturbacija $\hat{H}' \stackrel{\text{def}}{=} \hat{V}(\mathbf{r})$ potencijal koji potiče od fiksirane tačke. Početno stanje čestice $\mid n_0 \rangle$ neka je neko svojstveno stanje od $\hat{H}_0$ sa određenom vrednošću impulsa $\mathbf{p}_0$. Krajnje stanje $\mid n \rangle$ neka je takođe svojstveno stanje od $\hat{H}_0$ sa drugom vektorskom vrednošću impulsa $\mathbf{p}$.

Po formuli (3.4.13) postoji pozitivna verovatnoća da čestica pređe iz stanja $\mid n_0 \rangle = \mid \mathbf{p}_0 \rangle$ u stanje $\mid n \rangle = \mid \mathbf{p} \rangle$. Ali mora biti $\frac{\mathbf{p}_0^2}{2m} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, jer je polje $\hat{V}(\mathbf{r})$ konzervativno, te čestica nema sa čim da razmeni energiju. Ovaj proces je tzv. *elastično rasejanje* (koje ćemo pobliže izučiti u odeljku § 12.1).

Ako se rasejanje vrši na realnom fizičkom sistemu, onda postoji i mogućnost neelastičnog rasejanja, koje je propraćeno apsorpcijom energije (to ćemo proučavati u § 12.2).

3.4.9 Mehanizam procesa

Kao što je već rečeno, kvantna mehanika, kao u ostalom i klasična fizika, ima tu slabost da zbog prisustva perturbacije ne raspolaže tačnim rešenjima svojstvenog problema perturbovanog

[3.4.3] Energija vezivanja je moduo energije elektrona, a ova je negativna, jer elektron je vezan u ljusci.

hamiltonijana. Ali ona ovu slabost pretvara u prednost koja se sastoji u razumevanju mehanizma kvantnog procesa.

Kao što smo videli u prethodna tri paragrafa, strukturu kvantnog sistema zamišljamo preko neperturbovanog hamiltonijana, koji izražava dominantni deo ukupne strukture, a perturbacija je za nas uzročnik kvantnih prelaza iz jednog svojstvenog stanja neperturbovanog hamiltonijana u drugo.

U stvari, kao u opisanom slučaju posmatranja Auger-ovog efekta u Wilson-ovoj komori, ceo proces prelaza se odvija u prisustvu laboratorijskih instrumenata i mi ga tumačimo kao merenje opservable $\hat{H}_0$, tj. neperturbovanog hamiltonijana.

3.4.10 Paradoks nestabilnosti pobuđenih stanja

Na kraju ovog odeljka da se osvrnemo na jedan od osnovnih paradoksa na koji čovek nailazi pri ovladavanju fizikom kvantnih sistema. Kao što je poznato (bar iz fenomenološke atomske fizike), svaki kvantni sistem može da ostane beskonačno dugo *samo u osnovnom stanju* (kaže se da je to stanje *stabilno*). U svakom pobuđenom stanju može da provede samo konačan vremenski interval, onda se deekscituje (*nestabilno stanje*), po pravilu emitujući jedan ili više fotona. Ovo je potpuno opšta karakteristika svih kvantnih sistema.

Radi preciznog poimanja pojmova, da se podsetimo da je *osnovno stanje* po definiciji svojstveno stanje ukupnog hamiltonijana sistema koje odgovara najnižem diskretnom energetskom nivou. Sva svojstvena stanja koja odgovaraju višoj (diskretnoj ili kontinualnoj) energiji sistema, nazivaju se *pobuđenim* ili ekscitovanim stanjima.

Videli smo u § 3.2.2 da stacionarno početno stanje ostaje stacionarno za sva vremena (videti (3.2.11)). Po tome bi sva stacionarna stanja morala biti stabilna ako je sistem bez intervencije spolja. Zato imamo paradoks, koji je, kao i svaki paradoks, samo prividan. (Stvarni paradoks može da obori teoriju.)

Rešenje paradoksa sastoji se u tome da uobičajeni ukupni hamiltonijan kvantnog sistema obuhvata samo čestične stepene slobode, a ne sadrži u sebi mogućnost ekscitacije elektromagnetnog polja. Dakle, kvantna mehanika u svom uobičajenom obliku ima ograničenje što je samo mehanika, te što u svoje opisivanje ne uključuje mogućnost emisije fotona.

Zamislimo sad da je malopređašnji ukupni hamiltonijan kvantnog sistema u stvari neperturbovani hamiltonijan $\hat{H}_0$, a da perturbacija $\hat{H}'$ izražava latentno EM polje ili mogućnost emisije fotona ili, kako se ponekad kaže, virtuelne fotone sistema.

Ako je početno stanje osnovno stanje sistema, iz samog principa održanja energije (koji, naravno, važi i u kvantnoj mehanici) jasno je da se sistem ne može sam ekscitovati i stoga nema mogućnosti za prelaz u drugo stanje. Ako je pak početno stanje ekscitovano, onda održanje energije dozvoljava deekscitaciju emisijom fotona.

Ovo možemo razumeti i iz formule (3.4.3). Zbog prisustva perturbacije (i $\hat{U}' \neq \hat{I}$) mogući su prelazi koji su energetski dozvoljeni. Za razliku od primera u paragrafima § 3.4.6, § 3.4.7 i § 3.4.8, perturbacija u ovom slučaju opisuje jedan stepen slobode koji se može ekscitovati (može da primi energiju) i zato su mogući prelazi iz viših pobuđenih stanja u niža pobuđena ili osnovno stanje.

Kritički čitalac će na izloženo objašnjenje uzvratiti da on ne vidi da je paradoks stvarno otklonjen jer bi on očekivao da je pobuđeno stanje kvantnog sistema u stvari svojstveno stanje zaista ukupnog hamiltonijana, koji uključuje i stepen slobode virtuelnih fotona (i čak interakciju

ovog stepena slobode sa čestičnim stepenima slobode). Onda bi sistem trebalo da bude stabilan u tom stanju, a znamo da nije. Ne protivureči li to kvantnoj mehanici, u stvari evoluciji stanja po formuli (3.2.11)?!

Zaključak kontradikcije sledi iz pogrešne premise: da je sistem u svojstvenom stanju pomenutog „zaista ukupnog" hamiltonijana. Ovo je pogodno mesto da istaknemo osnovni značaj pojma prepariranja početnog stanja. Bez preparacije nema kvantno mehaničkog opisivanja. Naime, treba da se zapitamo šta zapravo znamo o kvantnom sistemu kada kažemo da je u ekscitovanom stanju, tj. kako smo preparirali ansambl o kojem govorimo.

Po pravilu, merenjem konstatujemo da je kvantni sistem izračio ili apsorbovao određene fotone i po tome (na osnovu nekog prethodnog znanja o sistemu) zaključujemo da sistem sad ima određeni energetski nivo. Obratiti pažnju da u stvari vršimo merenje na EM polju. U tom trenutku imamo dva podsistema: dotični kvantni sistem i EM polje koje merimo, i oni ne interaguju (fotoni ne mogu istovremeno da interaguju sa našim mernim aparatima i sa kvantnim sistemom). Direktno vršimo merenje na EM polju, a indirektno rezultat merenja se odnosi i na dotični kvantni sistem. Ovo je primer tzv. *distantnog merenja* (kvantni sistem je „distantan" u odnosu na merne instrumente, tj. oni s njim ne interaguju). Pobliže ćemo se upoznati sa ovom pojavom u paragrafu § 4.4.8.

Dakle, naše pomenuto direktno merenje EM polja svodi se na to da u stvari prevodimo dotični kvantni sistem u neko svojstveno stanje neperturbovanog hamiltonijana, a to je u ovom slučaju ukupni hamiltonijan koji obuhvata sve čestične stepene slobode bez EM polja. Znači, eksperimentalno ne prevodimo sistem u svojstveno stanje pomenutog „zaista ukupnog" hamiltonijana, niti se zna kako bi se to moglo učiniti.

Glava 4

RELACIJE NEODREĐENOSTI, MEŠAVINE I PROBLEM DVE ČESTICE

4.1 Relacije neodređenosti

Kvalitativni pojam principa neodređenosti, koji smo uveli na početku ovog udžbenika ćemo u ovom odeljku razraditi u kvantitativno formulisane relacije neodređenosti. Izvešćemo ih za opšti slučaj (i ovde prilazimo deduktivno), a onda ćemo ih suziti na kanonično konjugovane opservable, specijalno na koordinatu i impuls. Prodiskutovaćemo fizički smisao (uopštenih) svojstvenih vektora opservabli koordinata u kontekstu relacija neodređenosti. Definisaćemo stanje minimalne neodređenosti i ukazaćemo na neke ispravne i na neke neispravne intuitivne formulacije relacija neodređenosti. Na kraju, uz nešto anticipiranja rezultata iz teorije orbitnog uglovnog momenta, ukazaćemo na nepostojanje relacija neodređenosti za z-komponentu orbitnog uglovnog momenta i odgovarajući ugao.

4.1.1 Uvod i podsetnik

U odeljku § 1.2 upoznali smo se sa Heisenberg-ovim principom neodređenosti. On iskazuje da se dve opservable $\hat{A}$ i $\hat{B}$ koje su nekompatibilne ($[\,\hat{A},\hat{B}\,] \neq 0$) ne mogu istovremeno, tj. u istom mernom postupku, meriti sa proizvoljnom tačnošću; što određenije merimo jednu, to neodređenija postaje druga. (Precizna forma ovog iskaza biće data u § 4.1.8.)

U ovom odeljku izvešćemo kvantitativnu formu tog principa, tzv. relacije neodređenosti.

Podsetimo se iz § 1.4.10 da se *neodređenost* opservable $\hat{A}$ definiše kao pozitivni koren iz srednje kvadratne devijacije

$$\Delta\hat{A} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle\, (\hat{A} - \langle\, \hat{A}\,\rangle)^2\,\rangle}, \tag{4.1.1a}$$

gde je, na primer,

$$\langle\, A\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle, \tag{4.1.1b}$$

(u § 1.4.10 imali smo umesto $\hat{A}$ opštu stohastičku varijablu, X, a umesto $\langle\, \hat{A}\,\rangle$ pisali smo $\overline{X}$ itd.)

Treba zapaziti da je $\Delta\hat{A}$ nenegativan broj, funkcija opservable $\hat{A}$ i stanja ψ, a svrha mu je da izrazi kvantitativno "širinu" distribucije verovatnoća mogućih vrednosti opservable $\hat{A}$ u stanju ψ.

Zadatak 4.1.1 Objasniti zašto je $\langle\, \hat{A}\, \rangle$ u opštem slučaju realan, a $\langle\, (\hat{A} - \langle\, \hat{A}\, \rangle)^2\, \rangle^{\frac{1}{2}}$ nenegativan broj.

Podsetimo se, osim toga, da uvek važi (1.4.9)

$$(\Delta\hat{A})^2 = \langle\, \hat{A}^2\, \rangle - \langle\, A\, \rangle^2, \tag{4.1.2}$$

kao i činjenica u teoremu T 1.4.2 da je $\Delta\hat{A} = 0$ ako i samo ako opservabla $\hat{A}$ ima *oštru vrednost* u stanju $|\,\psi\,\rangle$; to će reći, ako je $|\,\psi\,\rangle$ svojstveni vektor od $\hat{A}$, $\hat{A}\,|\,\psi\,\rangle = a\,|\,\psi\,\rangle$, ta oštra vrednost je a (uporediti i K 2.2.1 i K 2.2.2).

Zadatak 4.1.2 Dokazati (4.1.2) na jeziku kvantne mehanike.

4.1.2 Relacije neodređenosti

Sada ćemo formulisati i dokazati osnovni teorem ovog odeljka.

Teorem 4.1.1 *Neka su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ dve proizvoljne opservable u prostoru stanja $\mathcal{H}$ kvantnog sistema i neka je $|\,\psi\,\rangle$ proizvoljni vektor stanja u $\mathcal{H}$ (ali takav da spada u domen operatora $\hat{A}$, $\hat{B}$ i $[\,\hat{A},\hat{B}\,]$). Onda proizvod neodređenosti od $\hat{A}$ i $\hat{B}$ u stanju $|\,\psi\,\rangle$ nije manji od $\frac{1}{2}|\langle\,[\,\hat{A},\hat{B}\,]\,\rangle|$, tj.*

$$\boxed{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \geq \tfrac{1}{2}|\langle\,[\,\hat{A},\hat{B}\,]\,\rangle|}. \tag{4.1.3}$$

To su relacije neodređenosti u opštem vidu.

Dokaz: U teoriji Hilbert-ovih prostora dobro je poznata tzv. Schwartz-ova[4.1.1] nejednakost, koja glasi

$$|\langle\, u\,|\,v\rangle|^2 \leq \langle\, u\,|\,u\rangle\langle\, v\,|\,v\rangle,\ \forall\,|\,u\,\rangle, |\,v\,\rangle \in \mathcal{H}. \tag{4.1.4}$$

Neka su $\hat{A}' \overset{\text{def}}{=} \hat{A} - \langle\,\hat{A}\,\rangle$, $\hat{B}' \overset{\text{def}}{=} \hat{B} - \langle\,\hat{B}\,\rangle$ tzv. operatori linearnih devijacija, i stavimo $|\,u\,\rangle \overset{\text{def}}{=} \hat{A}'\,|\,\psi\,\rangle$, $|\,v\,\rangle \overset{\text{def}}{=} \hat{B}'\,|\,\psi\,\rangle$. Izraz (4.1.4) onda daje

$$|\langle\psi\,|\,\hat{A}'\hat{B}'\,|\,\psi\,\rangle|^2 \leq \langle\psi\,|\,\hat{A}'^2\,|\,\psi\,\rangle\langle\psi\,|\,\hat{B}'^2\,|\,\psi\,\rangle. \tag{4.1.5}$$

Očigledno uvek važi

$$\hat{A}'\hat{B}' = \frac{1}{2}(\hat{A}'\hat{B}' + \hat{B}'\hat{A}') + \frac{1}{2}(\hat{A}'\hat{B}' - \hat{B}'\hat{A}'), \tag{4.1.6}$$

što je (jednoznačno) razlaganje linearnog operatora na hermitski i kosohermitski sabirak, kao što se lako vidi. Uzimanjem očekivane vrednosti

$$\langle\psi\,|\,\hat{A}'\hat{B}'\,|\,\psi\,\rangle = \frac{1}{2}\langle\psi\,|\,(\hat{A}'\hat{B}' + \hat{B}'\hat{A}')\,|\,\psi\,\rangle + \frac{1}{2}\langle\psi\,|\,[\,\hat{A}',\hat{B}'\,]\,|\,\psi\,\rangle \tag{4.1.7}$$

imamo na levoj strani kompleksan broj, a na desnoj strani realan plus čisto imaginaran (jednoznačno razlaganje broja). Stoga

$$\begin{aligned} |\langle\psi\,|\,\hat{A}'\hat{B}'\,|\,\psi\,\rangle|^2 &\geq \frac{1}{4}|\langle\psi\,|\,(\hat{A}'\hat{B}' + \hat{B}'\hat{A}')\,|\,\psi\,\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle\psi\,|\,[\,\hat{A}',\hat{B}'\,]\,|\,\psi\,\rangle|^2 \\ &\geq \frac{1}{4}|\langle\psi\,|\,[\,\hat{A}',\hat{B}'\,]\,|\,\psi\,\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle\psi\,|\,[\,\hat{A},\hat{B}\,]\,|\,\psi\,\rangle|^2 \end{aligned} \tag{4.1.8}$$

[4.1.1] Čitati: Švarcova.

(poslednji korak sledi iz toga što je komutator bilinearan, a broj uvek komutira). Preostaje samo da uočimo da je desna strana od (4.1.5) već $(\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2$ (uporediti (4.1.1*a*) i da (4.1.5) pomoću nejednakosti u (4.1.8) prepišemo u vidu

$$(\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 \geq \frac{1}{4}|\langle\ [\ \hat{A},\hat{B}\ ]\ \rangle|^2 \tag{4.1.9}$$

što korenovanjem daje (4.1.3). *Q. E. D.*

4.1.3 Kompatibilne opservable

Ako su opservable $\hat{A}$ i $\hat{B}$ kompatibilne, onda se (4.1.3) svodi na $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \geq 0$, što je trivijalno. Moguće je stanje $|\ \psi\ \rangle$ u kojem $\Delta\hat{A} = \Delta\hat{B} = 0$, tj. u kojem i $\hat{A}$ i $\hat{B}$ imaju oštru vrednost. To znači da je $|\ \psi\ \rangle$ zajednički svojstveni vektor za $\hat{A}$ i $\hat{B}$: $\hat{A}\ |\ \psi\ \rangle = a\ |\ \psi\ \rangle$, $\hat{B}\ |\ \psi\ \rangle = b\ |\ \psi\ \rangle$, a realni brojevi a odnosno b su dotične oštre vrednosti od $\hat{A}$ i $\hat{B}$ u stanju $|\ \psi\ \rangle$. Šta više, moguće je istovremeno[4.1.2] meriti $\hat{A}$ i $\hat{B}$. Naravno, kao i uvek, pod merenjem podrazumevamo neselektivno, prediktivno merenje.

4.1.4 Kanonično konjugovane opservable

Za dve opservable $\hat{A}$ i $\hat{B}$ kaže se da su *kanonično konjugovane* ako im je komutator jednak $\imath\hbar$:

$$[\ \hat{A},\hat{B}\ ] = \imath\hbar, \tag{4.1.10}$$

a da pri tome postoji bazis[4.1.3] u $\mathcal{H}$ u kojem se (4.1.10) reprezentuje matričnom relacijom $[\ A,B\ ] = \imath\hbar$.

Niže, u § 4.1.9, videćemo primer dve opservable koje zadovoljavaju (4.1.10), a nisu kanonično konjugovane. U slučaju dve kanonično konjugovane opservable $\hat{A}$ i $\hat{B}$, usled (4.1.10) nejednakost (4.1.3) postaje

$$\boxed{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \geq \tfrac{\hbar}{2}}. \tag{4.1.11}$$

Relacije neodređenosti su najbolje poznate u svom specijalnom vidu (4.1.11) i to naročito za najosnovniji par kanonično konjugovanih opservabli, *za koordinatu i impuls*:

$$\boxed{\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}_x \geq \tfrac{\hbar}{2}}. \tag{4.1.12}$$

i analogno za y- i z-komponente u slučaju trodimenzionalne čestice.

Zadatak 4.1.3 Proveriti važenje nejednakosti (4.1.12) na ravnom talasu u $\mathcal{H}_x$. U čemu je razrešenje dobijene prividne protivrečnosti?

[4.1.2*] Komutiranje $[\ \hat{A},\hat{B}\ ] = 0$ je ekvivalentno postojanju zajedničkog svojstvenog bazisa za $\hat{A}$ i $\hat{B}$ u $\mathcal{H}$ ili u $\mathcal{U}(\mathcal{H})$. Može se desiti da je $[\ \hat{A},\hat{B}\ ] \neq 0$, a da $\hat{A}$ i $\hat{B}$ ipak imaju neke zajedničke svojstvene vektore. Ako je $|\ \psi\ \rangle$ takav vektor, onda je desna strana od (4.1.3) nula i u tom stanju i $\hat{A}$ i $\hat{B}$ imaju oštru vrednost. Ali u ovakvom slučaju nemamo zajednički svojstveni bazis za $\hat{A}$ i $\hat{B}$ i stoga nije moguće izmisliti merni postupak koji bi u proizvoljnom stanju istovremeno merio $\hat{A}$ i $\hat{B}$. (Tu se misli na neselektivno merenje; uporediti § 1.4.14.)

[4.1.3*] Egzistencija takvog bazisa ekvivalentna je tome da je presek domena od $\hat{A}$, domena od $\hat{B}$ i domena od $[\ \hat{A},\hat{B}\ ]$ linearna mnogostrukost gusta u $\mathcal{H}$. Onda se u njoj bira dotični bazis. Obratno, ako postoji dotični bazis, sve linearne kombinacije bazisnih elemenata čine pomenutu linearnu mnogostrukost (koja je onda *a fortiori* gusta u $\mathcal{H}$).

4.1.5 Istorijski put

Istorijski razvoj ideja je i kod relacija neodređenosti išao induktivno, tj. od posebnog ka opštem. Prvo je W. Heisenberg 1927. godine[4.1.4] analizom eksperimenata otkrio relacije (4.1.12). Tada je Robertson 1929. godine[4.1.5] izveo uopštenje (4.1.11) za proizvoljan par kanonično konjugovanih opservabli $\hat{A}$ i $\hat{B}$, ali takvih da su analitičke funkcije od $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$. E. Schrödinger je 1930. godine[4.1.6] dao opštu formulu (4.1.3).

4.1.6 Lokalizacija slobodne čestice u tački

Sada ćemo proanalizirati fizički smisao uopštenih vektora $\mid \hat{\mathbf{r}} \rangle \in \mathcal{U}(\mathcal{H}_0)$ na osnovu relacija neodređenosti.

Lema 4.1.1 *Za jednodimenzionalnu slobodnu česticu u proizvoljnom stanju iz $\mathcal{H}_x$ važi:*

$$\langle \hat{H} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta\hat{x})^2}. \tag{4.1.13}$$

Dokaz: Pošto je čestica slobodna, $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$. Iz (4.1.2) sledi: $\langle \hat{p}_x^2 \rangle = (\Delta\hat{p}_x)^2 + \langle \hat{p}_x \rangle^2$. Stoga $\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2m}\langle \hat{p}_x^2 \rangle = \frac{1}{2m}(\Delta\hat{p}_x)^2 + \frac{1}{2m}\langle \hat{p}_x \rangle^2 \geq \frac{1}{2m}(\Delta\hat{p}_x)^2$ (odbacili smo nenegativan broj). Iz relacija neodređenosti (4.1.12) imamo $(\Delta\hat{p}_x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4(\Delta\hat{x})^2}$, što u kombinaciji sa prethodnom nejednakošću daje: $\langle \hat{H} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta\hat{x})^2}$. *Q. E. D.*

Korolar 4.1.1 *Za trodimenzionalnu slobodnu česticu u proizvoljnom stanju iz $\mathcal{H}_0$ važi*[4.1.7]*:*

$$\langle \hat{H} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{1}{(\Delta\hat{x})^2} + \frac{1}{(\Delta\hat{y})^2} + \frac{1}{(\Delta\hat{z})^2}\right) \tag{4.1.14}$$

Dokaz: $\langle \hat{H} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}_y^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}_z^2$. $\langle \hat{H} \rangle$ je odgovarajući zbir srednjih vrednosti i svaki sabirak možemo na osnovu leme da minoriramo (naravno, lema važi analogno u $\mathcal{H}_y$ i $\mathcal{H}_z$), što odmah daje (4.1.14). *Q. E. D.*

Zamislimo lokalizaciju čestice u tački, tj. postizanje stanja $\mid \mathbf{r}_0 \rangle$ u apstraktnom $\mathcal{U}(\mathcal{H}_0)$ ili stanja $\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}) \in \mathcal{U}(\mathcal{L}^2(\mathbf{r}))$, koje ga predstavlja u koordinatnoj reprezentaciji. Uopštenu funkciju $\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})$ možemo predstaviti kao limes pravih vektora stanja iz $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ i to sa sve manjim disperzijama $\Delta\hat{x}$, $\Delta\hat{y}$ i $\Delta\hat{z}$. Drugim rečima, $\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}) = \lim_{n\to\infty}\psi_n(\mathbf{r})$, a $\Delta_n\hat{x} \to 0$, $\Delta_n\hat{y} \to 0$ i $\Delta_n\hat{z} \to 0$, gde je na primer $\Delta_n\hat{x} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle\psi_n \mid (\hat{x} - \langle\psi_n \mid \hat{x} \mid \psi_n\rangle)^2 \mid \psi_n\rangle}$.

Stanjima $\mid \mathbf{p}_0 \rangle$, koja odgovaraju lokalizaciji impulsa u tačku (impulsnog prostora), možemo se proizvoljno blizu primaći i ona imaju fizički smisao stanja sa određenim impulsom. U teoriji rasejanja ona daju prirodan i veoma koristan bazis.

Međutim, iz (4.1.14) sledi $\langle \hat{H} \rangle \to \infty$, tj. (kinetička) *energija* slobodne čestice *raste ka beskonačnosti.* To znači, kako se primičemo graničnom slučaju lokalizacije čestice u tački, moramo

---

[4.1.4] W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik*, **43** (1927) 172.

[4.1.5] H. P. Robertson, *Physical Review*, **34** (1929) 163.

[4.1.6] E. Schrödinger, *Preussische Akademie der Wissenschaften*, Berlin, Berichten **19** (1930) 296.

[4.1.7*] Kao što je uobičajeno u kvantnoj mehanici, potpuno smo zanemarili mogućnost da vektor stanja koji je implicitno prisutan u (4.1.14) može da bude van domena nekog od operatora, te da neka od veličina u (4.1.14) može da bude nedefinisana. To za našu svrhu nije važno i rigorozno rezonovanje bi predstavljalo nepotrebnu komplikaciju.

čestici dovoditi neograničene količine energije. Time se srednja brzina čestica mora približavati brzini svetlosti (a masa mora da raste neograničeno) i izlazimo iz domena nerelativističke fizike.

U relativističkoj kvantnoj fizici je poznato da pri dovoljno velikoj energiji čestice, može da se stvori par antičestica (tj. čestica i njena antičestica). Tako svaka čestica u stvari poseduje prirodan mehanizam "odbrane" od lokalizacije u tački. Ali, da još jedanput naglasimo, ovaj fenomen je van domašaja nerelativističke kvantne mehanike, koju proučavamo.

Dakle, za slobodnu česticu stanje $| \mathbf{r}_0 \rangle$ u stvari nema neposrednog fizičkog smisla (predstavlja samo korisnu matematičku idealizaciju), jer se ne može sa proizvoljnom tačnošću preparirati ansambl slobodnih čestica u tom stanju[4.1.8].

4.1.7 Stanje minimalne neodređenosti

Pažljivi čitalac je primetio da relacije neodređenosti (4.1.11), kao i (4.1.3) i (4.1.12), uključuju i jednakost. Ako su opservable $\hat{A}$ i $\hat{B}$ kanonično konjugovane i stanje $| \psi \rangle$ je takvo da u (4.1.11) važi jednakost

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{\hbar}{2}, \tag{4.1.15}$$

onda se kaže da je $| \psi \rangle$ *stanje minimalne neodređenosti* za opservable $\hat{A}$ i $\hat{B}$. Iz dokaza Teorema T 4.1.1 možemo zaključiti kako glasi potreban i dovoljan uslov za takvo stanje.

Teorem 4.1.2 *Neka su A i B dve proizvoljne date kanonično konjugovane opservable u prostoru stanja $\mathcal{H}$. Vektor stanja $| \psi \rangle$ je za njih stanje minimalne neodređenosti ako i samo ako*

i) $| \psi \rangle$ pripada domenu od $\hat{A}$, $\hat{B}$ i $[\, \hat{A}, \hat{B}\,]$, i

ii) $| \psi \rangle$ zadovoljava jednakost

$$(\hat{A} - a) \mid \psi \rangle = \imath c(\hat{B} - b) \mid \psi \rangle, \tag{4.1.16}$$

gde su a, b i c neki realni brojevi. Najzad, ako (4.1.16) važi za $| \psi \rangle$, onda je nužno $a = \langle \psi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle = \langle\, \hat{A}\, \rangle$, $b = \langle \psi \mid \hat{B} \mid \psi \rangle = \langle\, \hat{B}\, \rangle$ i $c \neq 0$, $|c| = \frac{\hbar}{2(\Delta\hat{B})^2}$.

Dokaz: * *Potrebnost.* Vratimo se na dokaz Teorema T 4.1.1. Pre svega potrebno je da u Schwartz-ovoj nejednakosti (4.1.5) imamo jednakost. Poznato je da je to slučaj ako i samo ako su dva faktora u skalarnom proizvodu na levoj strani od (4.1.5), tj. $\hat{A}' \mid \psi \rangle$ i $\hat{B}' \mid \psi \rangle$, kolinearni, tj. proporcionalni jedan drugom:

$$(\hat{A} - \langle\, \hat{A}\, \rangle) \mid \psi \rangle = g(\hat{B} - \langle\, \hat{B}\, \rangle) \mid \psi \rangle \tag{4.1.17}$$

(g je kompleksan broj). Osim toga potrebno je takođe da u nejednakosti u (4.1.8) stoji jednakost, tj. da imamo $\langle \psi \mid (\hat{A}'\hat{B}' + \hat{B}'\hat{A}') \mid \psi \rangle = 0$. Ako ovde zamenimo $\hat{A}' \mid \psi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{A} - \langle\, \hat{A}\, \rangle) \mid \psi \rangle$ iz (4.1.17), dobićemo

$$(g^* + g)(\Delta\hat{B})^2 = 0 \tag{4.1.18}$$

(u bra-verziji od (4.1.17) g se kompleksno konjuguje). Ne može biti $\Delta\hat{B} = 0$, jer bi to protivurečilo (4.1.11). Stoga mora biti $g^* + g = 0$, tj. g mora biti čisto imaginaran broj. Zamenom $g \stackrel{\text{def}}{=} \imath c$ (c je realan broj), $a \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, \hat{A}\, \rangle$,

[4.1.8] To ne znači da pomenuta stanja $| \psi_n \rangle$, koja teže ka $\delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})$, nemaju fizičkog smisla niti da lokalizacija vezane čestice nije moguća sa proizvoljnom tačnošću. Zamislimo, na primer, da česticu u $\mathcal{H}_x$ vezuje potencijalna jama. Kada dubina jame teži beskonačnosti, a širina nuli, onda je u jami vezana čestica sve bolje lokalizovana i imamo konvergenciju ka lokalizaciji u tački.

$b \stackrel{\text{def}}{=} \langle \hat{B} \rangle$, se (4.1.17) svodi na (4.1.16).

Dovoljnost. Pretpostavićemo da važi (4.1.16). Množeći ovu jednakost s leva sa $\langle \psi \mid$, dobijamo: $\langle \psi \mid (\hat{A} - a) \mid \psi \rangle = \imath c \langle \psi \mid (\hat{B} - b) \mid \psi \rangle$. To znači da je realan broj jednak čisto imaginarnom; dakle, oba su jednaka nuli. Stoga $a = \langle A \rangle$ i $b = \langle B \rangle$, kao što smo tvrdili u Teoremu. Sad (4.1.16) postaje $\hat{A}' \mid \psi \rangle = \imath c \hat{B}' \mid \psi \rangle$. To je pre svega dovoljan uslov da Schwartz-ova nejednakost (4.1.5) važi kao jednakost. Osim toga, $\langle \psi \mid (\hat{A}'\hat{B}' + \hat{B}'\hat{A}') \mid \psi \rangle = (-\imath c + \imath c)(\Delta \hat{B})^2 = 0$, tako da i nejednakost u (4.1.8) važi kao jednakost i stoga mora da važi (4.1.15). Ako u (4.1.15) zamenimo (4.1.16), dolazimo do jednakosti $|c|(\Delta \hat{B})^2 = \frac{\hbar}{2}$, što iziskuje $c \neq 0$ i $|c| = \frac{\hbar}{2(\Delta \hat{B})^2}$. *Q. E. D.*

Stanje minimalne neodređenosti za impuls i koordinatu u koordinatnoj reprezentaciji naziva se talasnim paketom minimalne neodređenosti ili kratko *minimalnim talasnim paketom.*

Zadatak 4.1.4 a) Pokazati da je nenormirana talasna funkcija

$$\psi(x) = \exp(-\frac{(x - \overline{x})^2}{4f^2} + \frac{\imath \overline{p} x}{\hbar}), \tag{4.1.19}$$

$\overline{x}$, $\overline{p}$, f su realni brojevi, minimalni talasni paket. Da li su $\overline{x}$, $\overline{p}$, f slobodni ili fiksirani parametri? Kako glasi njihova statistička interpretacija?

b) Na osnovu tabličnog integrala $\int_0^\infty e^{-g^2 x^2} \, dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2g}$, $g > 0$, normirati gore dobijenu funkciju $\psi(x)$.

4.1.8 Intuitivne interpretacije

U formulaciji principa neodređenosti (odeljak § 4.1.1) rekli smo "što određenije merimo jednu od dve nekompatibilne opservable, to neodređenija postaje druga". Pitamo se šta je precizno značenje ovog iskaza sa gledišta relacija neodređenosti.

Zamislimo merni postupak koji treba da odredi u kom od intervala $\cdots, [-f, 0), [0, f), [f, 2f), \cdots$ leži x-koordinata čestice i istovremeno u kom od intervala $\cdots, [-g, 0), [0, g), [g, 2g), \cdots$ leži p_x. Pitamo se da li pozitivni brojevi f i g mogu biti oba proizvoljno mali.

Lako je videti da je $\Delta \hat{x} \leq f$ i $\Delta \hat{p}_x \leq g$ u stanju koje nastaje nakon selektivnog merenja (sa bilo kojim od pomenutih mogućih rezultata); naime, f, na primer, jeste očigledno gornja granica za pojedinačne linearne devijacije (f^2 za kvadratne itd.). Dakle,

$$fg \geq \Delta \hat{x} \Delta \hat{p}_x \geq \frac{1}{2}\hbar. \tag{4.1.20}$$

Vidimo da merni postupci ovog tipa[4.1.9] imaju osobinu da čim manjim uzmemo recimo f, tim veće mora biti g ili obratno. I to onda važi i za svako pojedinačno merenje. To je traženi precizni smisao gornjeg iskaza komplementarnosti. Treba naglasiti da sve što je rečeno važi samo za *prediktivno merenje*, koje u selektivnoj varijanti prediktabilno menja stanje (tako da je istovremeno i preparacija). *Za retrospektivno merenje relacije neodređenosti ne važe.* Može se smisliti retrospektivno merenje koje istovremeno meri x i p_x, obe proizvoljno precizno.

U literaturi se još često nalazi jedna od sledeće dve intuitivne interpretacije relacija neodređenosti (a ponekad i obe):

[4.1.9] U stvari, formulacija u tekstu sadrži jedno, možda nedopustivo pojednostavljenje: ispred "leži x-koordinata" i "leži p_x" (misli se na intervale dužine f i g) treba da stoji "dominantnom verovatnoćom". Naime, ne postoji pravi potprostor stanja koji bi, u smislu teksta, odgovarao intervalima $[0, f)$ i $[0, g)$ na primer, i to zato što je skup $\{\hat{x}, \hat{p}_x\}$ ireducibilan u prostoru stanja.

a) Merenje koordinate x prouzrokuje nepredskaziv i nekontrolabilan poremećaj u vrednosti p_x i obratno.

b) Položaj x i impuls p_x čestice čak i ne postoje sa istovremeno potpuno tačnim (mada možda nepoznatim) vrednostima.

Prvi iskaz se može naći u pomenutom radu Heisenberg-a iz 1927. (primedba 4.1.4), a drugi u knjizi Bohm-a[4.1.10]

Međutim, u novije vreme se došlo do zaključka da se ovi iskazi ne mogu precizno izvesti iz relacija neodređenosti i da, prema tome, predstavljaju prevaziđene poglede na kvantne fenomene. Ovi iskazi pripadaju epohi stvaranja kvantne mehanike. Pored posledice (4.1.20), koju smo izveli, *osnovna interpretacija* relacija neodređenosti je *statistička*: radi se o neodređenostima $\Delta\hat{A}$ i $\Delta\hat{B}$, koje izražavaju "širine" odgovarajućih distribucija verovatnoća i, prema tome, odnose se na merenje na čitavom *ansamblu* kvantnih sistema, koji eksperimentalno odgovara vektoru stanja $|\,\psi\,\rangle$.

4.1.9 uglovni moment i ugao

U ovom paragrafu anticipiraćemo neke rezultate kasnijih proučavanja (čitati ponovo posle § 6.5). Naime, pokazaće se da se čestica može i kvantnomehanički opisivati sfernim polarnim koordinatama r, θ i φ; šta više, pojavljuje se faktor prostor stanja $\mathcal{L}^2(\varphi)$, koji se sastoji od funkcija koje zavise samo od azimuta φ. U tom prostoru može se definisati i opservabla z-projekcije orbitnog uglovnog momenta $\hat{l}_z$ i opservabla azimuta $\hat{\varphi}$ (koja je multiplikativni operator). Pri tome važi

$$[\,\hat{\varphi},\hat{l}_z\,] = \imath\hbar. \tag{4.1.21}$$

A ipak, grubo rečeno, relacije neodređenosti ne važe za ove opservable. Naime, postoje stanja $|\,\psi\rangle$ sa oštrim vrednostima za $\hat{l}_z$, dakle sa $\Delta\hat{l}_z = 0$, u protivurečnosti sa $\Delta\hat{\varphi}\Delta\hat{l}_z \geq \frac{1}{2}\hbar$. Kontradikciju dobijamo i uzimanjem očekivane vrednosti $\langle\psi\mid\cdots\mid\psi\,\rangle$ od operatorske jednakosti (4.1.21) u svojstvenom stanju $|\,\psi\,\rangle$ od $\hat{l}_z$; sledi $0 = \imath\hbar$, kao što se lako vidi.

Razrešenje paradoksa je u tome što pomenuto stanje $|\,\psi\,\rangle$ (sa $\Delta\hat{l}_z = 0$) ne spada u domen operatora $[\,\hat{\varphi},\hat{l}_z\,]$ (uporediti uslov za $|\,\psi\rangle$ u Teoremu T 4.1.1). Naime, kao što će se ispostaviti u § 6.5.8, domen operatora $\hat{l}_z$ ograničen je na periodične funkcije, a $\hat{\varphi}$ je multiplikativni operator. Nakon njegove primene, tj. nakon množenja sa φ, periodična funkcija više nije periodična. Funkcija iz domena operatora $\hat{\varphi}\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{\varphi}$ mora biti periodična da bi $\hat{l}_z$ bilo primenljivo, a s druge strane, onda sigurno nije u domenu od $\hat{l}_z\hat{\varphi}$, kao što smo rekli.

Dakle, domen od $[\,\hat{\varphi},\hat{l}_z\,]$ sadrži samo nulti vektor (a ne ceo bazis) i zbog toga (uporediti § 4.1.4) se $\hat{\varphi}$ i $\hat{l}_z$ ne mogu smatrati kanonično konjugovanim opservablama u kvantnoj mehanici iako to jesu u klasičnoj fizici.

4.2 Relacije neodređenosti energije i vremena

Dok je hamiltonijan bez sumnje najvažnija opservabla pri kvantno-mehaničkom opisivanju sistema, njoj kanonično konjugovana varijabla u klasičnoj fizici, vreme, uopšte nije opservabla.

[4.1.10] D. Bohm, *Quantum Theory*, New York, Prentice-Hall, Inc., 1952; str. 100.

Međutim, eksperimentalno iskustvo pokazuje da i za energiju i vreme važe relacije neodređenosti analogno kao u slučaju normalnih parova kanonično konjugovanih opservabli. Kako to uklopiti u teoriju? Odgovoru na ovo pitanje posvećen je ovaj odeljak.

4.2.1 Uvod

Kao što je čitaocu do sada bez sumnje postalo jasno, konceptualna struktura kvantne mehanike je takva da se sastoji iz dva jasno razdvojena dela: iz predikcije u fiksiranom trenutku t (čijem smo izlaganju posvetili prve dve glave) i iz zakona kretanja, kojim se prebacujemo iz opisivanja u jednom trenutku u opisivanje u drugom, kasnijem trenutku (glava treća).

Što se tiče prvog dela, tu u osnovi leži implicitna pretpostavka da se u principu sve opservable mogu trenutno meriti. To je svakako idealizacija, ali je fizički održiva u smislu graničnog slučaja: u principu merenje opservable $\hat{A}$ može da traje proizvoljno kratko (iako nužno konačan interval vremena!), a da rezultat bude jedan te isti, kakav sledi kvantno-mehaničkom predikcijom iz stanja $|\,\psi\,\rangle$.

Postoji jedna opservabla, međutim, za koju se dobro zna da njeno tačno merenje u principu ne može da traje proizvoljno kratko. To je hamiltonijan, tj. energija kvantnog sistema. Stvaraoci kvantne mehanike bili su na osnovu empirijskih izvora potpuno sigurni da i za energiju i vreme važi princip neodređenosti analogno kao za ostale parove klasičnih kanonično konjugovanih varijabli.

Ali nije bilo moguće izraziti vreme kao opservablu naporedo sa prostornim koordinatama, te princip neodređenosti energije i vremena nužno glasi drugačije negoli (4.1.11). Zahvaljujući tome kvantna mehanika sadrži fikciju trenutnih oštrih vrednosti energije kvantnog sistema ili trenutnih stacionarnih stanja.

Kao što ćemo videti u paragrafu § 4.2.4, kvantno-mehaničko opisivanje nestacionarnih stanja je konzistentno sa relacijom neodređenosti koja sadrži neodređenost energetskog nivoa i dužinu intervala vremena koji je potreban da se izvrši merenje tog nivoa.

4.2.2 Neodređenost vremena

Prilično je kontraverzno pitanje u kom vidu kvantna mehanika ipak treba da sadrži neku vrstu relacija neodređenosti za energiju i vreme. U svakom slučaju nije moguće, kao što smo rekli, formirati obe neodređenosti $\Delta\hat{H}$ i Δt na isti način kao u prethodnom odeljku. Preostaju dve mogućnosti:

(a) da se $\Delta\hat{H}$ definiše kao neodređenost hamiltonijana na isti način kao i za svaku drugu opservablu, a Δt na nekakav drugi pogodan način;

(b) da se i ΔE i Δt definišu različito od drugih opservabli.

Prikazaćemo samo varijantu (a), iako se mnogi autori[4.2.1] odlučuju za varijantu (b).

Varijanta (a) se pojavljuje u dve podvarijante:

[4.2.1] Na primer: Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивстская теория*, (Наука, Москва, 1974); str. 189.

(a.1) Da se na pogodan način definiše neodređenost vremena sa gledišta vremenske promene u distribuciji verovatnoće po mogućim mernim rezultatima neke pogodne opservable $\hat{A}$. Takvo Δt pisaćemo $\tau_{\hat{A}}$.

(a.2) Da se uzme minimalna vrednost (ili preciznije, tzv. infimum ili najveća minoranta) svih $\tau_{\hat{A}}$ (znači, po svim mogućim pogodnim opservablama). Ovu neodređenost vremena pisaćemo sa τ.

4.2.3 Relacije neodređenosti energije i vremena

Formulišimo sad podvarijantu (a.1), koja leži u osnovi i podvarijante (a.2).

Opservablu $\hat{A}$ nazivaćemo *pogodnom* u trenutku t u stanju $\psi(t)$ ako *(i)* ona u Schrödinger-ovoj slici ne zavisi od vremena i *(ii)* $(\frac{\mathrm{d}\langle\, \hat{A}\,\rangle}{\mathrm{d}t})_t \neq 0$. Za svaku pogodnu opservablu definisaćemo $\tau_{\hat{A}}$.

U opštem slučaju srednja vrednost $\langle\, \hat{A}\,\rangle$ zavisi od vremena i $\frac{\mathrm{d}\langle\, \hat{A}\,\rangle}{\mathrm{d}t}$ je brzina njenog "pomeranja". Veličina

$$\tau_{\hat{A}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Delta\hat{A}}{|\frac{\mathrm{d}\langle\, \hat{A}\,\rangle}{\mathrm{d}t}|}, \tag{4.2.1}$$

gde je $\Delta\hat{A}$ neodređenost od $\hat{A}$ u $|\,\psi\rangle$, predstavlja minimalno karakteristično vreme za vremensku promenu distribucije. Naime, pomeranje srednje vrednosti za iznos $\Delta\hat{A} = \tau_{\hat{A}}|\frac{\mathrm{d}\langle\, \hat{A}\,\rangle}{\mathrm{d}t}|$ je najmanje primetno pomeranje ove vrednosti.

Teorem 4.2.1 *Pod pretpostavkom da je* $|\,\psi(t)\,\rangle$ nestacionarno stanje *(da bismo isključili* $\Delta\hat{H} = 0$*) i da je* $\hat{A}$ *pogodna opservabla u trenutku* t *u stanju* $|\,\psi(t)\,\rangle$, *važi nejednakost*

$$\boxed{\tau_{\hat{A}}\Delta\hat{H} \geq \tfrac{1}{2}\hbar}, \tag{4.2.2a}$$

gde je $\Delta\hat{H}$ *neodređenost hamiltonijana:*

$$\Delta\hat{H} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle\psi(t)\mid(\hat{H} - \langle\psi(t)\mid\hat{H}\mid\psi(t)\,\rangle)^2\mid\psi(t)\,\rangle}, \tag{4.2.2b}$$

a $\tau_{\hat{A}}$ *je definisano sa (4.2.1).*

Dokaz: Iz (4.1.3) odmah sledi

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{H} \geq \frac{1}{2}|\langle\,[\,\hat{A},\hat{H}\,]\,\rangle|. \tag{4.2.3}$$

S druge strane, u Heisenberg-ovoj slici važi $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{A}_H}{\mathrm{d}t} = [\,\hat{A}_H,\hat{H}_H\,]$, jer po pretpostavci opservabla $\hat{A}$ je pogodna, te $\frac{\partial\hat{A}_H}{\partial t} = 0$ (uporediti (3.3.5a)). Uzimanjem očekivane vrednosti $\langle\psi_H\mid\cdots\mid\psi_H\,\rangle$ dobija se $\imath\hbar\langle\psi_H\mid\frac{\mathrm{d}\hat{A}_H}{\mathrm{d}t}\mid\psi_H\,\rangle = \langle\psi_H\mid[\,\hat{A}_H,\hat{H}_H\,]\mid\psi_H\,\rangle$ ili $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\langle\psi_H\mid\hat{A}_H\mid\psi_H\,\rangle) = \langle\psi_H\mid[\,\hat{A}_H,\hat{H}_H\,]\mid\psi_H\,\rangle$. Pošto je ovo brojna jednakost, ona je invarijantna pri prelasku na Schrödinger-ovu sliku: $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\langle\psi_H\mid\hat{A}\mid\psi_H\,\rangle) = \langle\psi_H\mid[\,\hat{A},\hat{H}\,]\mid\psi_H\,\rangle$.
Zamenjujući $\langle\,[\,\hat{A},\hat{H}\,]\,\rangle$ iz poslednje jednakosti u nejednakost (4.2.3), dolazimo do $\Delta\hat{A}\Delta\hat{H} \geq \frac{1}{2}\hbar|\frac{\mathrm{d}\langle\,\hat{A}\,\rangle}{\mathrm{d}t}|$, što pomoću (4.2.1) odmah ima (4.2.2a) za posledicu. *Q. E. D.*

Nejednakost (4.2.2a) važi za svaku pogodnu opservablu $\hat{A}$ i to sa istom vrednošću $\Delta\hat{H}$. Stoga možemo zamisliti skup $\{\tau_{\hat{A}}\mid\forall\hat{A}\}$ po pogodnim opservablama i definisati

$$\tau \stackrel{\text{def}}{=} \inf\{\tau_{\hat{A}}\mid\forall\hat{A}\}, \tag{4.2.4}$$

gde "inf" označava infimum ili najveću minorantu tog skupa. Pošto je τ (kao infimum) ili jedan od $\tau_{\hat{A}}$, ili je limes ovakvih veličina, iz (4.2.2a) sledi

$$\boxed{\tau\Delta\hat{H} \geq \frac{1}{2}\hbar} \tag{4.2.5}$$

i, prema tome, $\tau > 0$. Očigledno, τ je teorijski najpogodnije minimalno karakteristično vreme za kvantni sistem u stanju $\mid \psi(t) \rangle$. Izraz (4.2.5) predstavlja relacije neodređenosti energije i vremena u podvarijanti (a.2).

4.2.4 Merenje energije

Zamislimo da imamo jedan prostorni ansambl kvantnih sistema, na primer jednu tzv. metu od atomskih jezgara i da želimo da izmerimo energiju tih jezgara. Moramo da bombardujemo metu snopom čestica, pa da izvučemo traženu informaciju iz interakcije tih čestica sa jezgrima.

Snop čestica u svojstvenom stanju impulsa, opisan ravnim talasom, predstavljao bi realizaciju potpuno monohromatskog ili monoenergetskog ansambla čestica, ali svaka od tih čestica bi bila potpuno nelokalizovana (uporediti (4.1.12)) i njom ne bismo mogli pogoditi jezgro.

Da bi došlo do pogađanja mete, moramo, kao što se kaže, kolimirati snop čestica, tj. propustiti ga kroz dva paralelna otvora i nanišaniti s njim na metu. Tako u stvari prepariramo talasni paket, u kojem su koherentno pomešana mnoga stanja sa različitim oštrim vrednostima impulsa. Pošto je $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2$, to znači da imamo nestacionarno stanje sa neodređenošću energije $\Delta\hat{H} > 0$. Neodređenost sa kojom ćemo izmeriti energetski nivo jezgra očigledno ne može biti manja od ovog $\Delta\hat{H}$.

Neka je x-osa postavljena duž kretanja snopa čestica. Trajanje interakcije između čestica i jezgara ne može biti manje nego što je minimalno karakteristično vreme $\tau_{\hat{x}}$ za pomeranje lokalizacije čestice duž x-ose.

Znači, ako sa ΔE i $\Delta\tau$ obeležimo neodređenost u izmerenoj energiji jezgra odnosno najkraće trajanje samog merenja, iz $\Delta E \geq \Delta\hat{H}$ i $\Delta\tau \geq \tau_{\hat{x}}$ sledi

$$\Delta E\Delta\tau \geq \Delta\hat{H}\tau_{\hat{x}} \geq \hbar/2. \tag{4.2.6}$$

Kao što smo rekli, iz teorije nestacionarnih procesa izvodimo zaključak, koji je potvrđen empirijskim činjenicama, da "širina" energetske raspodele i minimalno trajanje merenja te raspodele zadovoljavaju relacije neodređenosti vida (4.2.6).

4.2.5 Širina energetskih nivoa

Već smo isticali činjenicu da je kod svih kvantnih sistema samo energetski nivo osnovnog stanja (tj. najniži nivo) stabilan, svi ostali, pobuđeni, nivoi su nestabilni i nužno se pre ili kasnije deekscituju (uporediti odeljak § 3.4.10).

Univerzalna je empirijska činjenica da pogodno definisana "širina" pobuđenih nivoa ΔE i poluživot[4.2.2] raspadanja $\tau_{\frac{1}{2}}$ zadovoljavaju relaciju

$$\Delta E\tau_{\frac{1}{2}} \geq \hbar, \tag{4.2.7}$$

[4.2.2] Kao što je poznato, poluživot ili period poluraspadanja $\tau_{\frac{1}{2}}$ je dužina vremenskog intervala u kojem broj kvantnih sistema spadne na polovinu. Lako se može pokazati da je $\tau_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0.6931}{\lambda}$, gde je λ tzv. konstanta raspadanja. Dakle, $\tau_{\frac{1}{2}}$ i λ su ekvivalentne veličine, obe karakterišu brzinu kojom se kvantni sistem raspada.

tj. predstavljaju neku vrstu stanja minimalne neodređenosti energije i vremena. Dakle, nivoi sa manjom širinom ("bolje definisani") žive duže, tj. sporije se raspadaju. Širi (ili "slabije definisani") nivoi, nasuprot tome, žive kraće, tj. raspadaju se brže.

Treba zapaziti da se u slučaju deekscitacije radi o emisiji čestica (obično fotona), a ne o pomeranju distribucija verovatnoća za razne opservable $\hat{A}$, kao kod stabilnih kvantih sistema. Zato se $\tau_{\hat{A}}$ ili τ ili $\Delta\tau$ iz paragrafa § 4.2.3 i § 4.2.4 moraju zameniti drugim minimalnim karakterističnim intervalom vremena za proces raspadanja kvantnog sistema. Poluživot $\tau_{\frac{1}{2}}$ je takva veličina.

Što se tiče osnovnog stanja, ono je večno ako je izolovano, kao što smo rekli. Iako energetski nivo osnovnog stanja ima širinu nula, tj. ima oštru vrednost, to u suštini ne protivureči relaciji (4.2.7). Naime, ako bismo prediktivnim merenjem merili energiju osnovnog stanja (a samo za prediktivno merenje važe relacije neodređenosti, uporediti § 4.1.6), morali bismo vršiti "negativno" merenje (uporediti § 2.4.10), tj. morali bismo zaključivati po tome što nema emitovane čestice da je sistem još neraspadnut. Ali da bismo bili sigurni da je sistem stabilan, a ne samo da je $\tau_{\frac{1}{2}} \gg 1$, morali bismo meriti beskonačno dugo.

4.3 Mešano stanje i kvantna statistička fizika

U ovom odeljku posvetićemo pažnju problemu kako da se tretira mešano stanje na najpraktičniji način u kvantnoj fizici. Analizom samog pojma mešanog stanja pokazaćemo da je najpogodniji matematički objekat za njegovo opisivanje u formalizmu kvantne mehanike *statistički operator* ili *matrica gustine*. Formulisaćemo i dokazati teoreme koji će omogućiti da statistički operator bude u punoj meri pandan vektoru stanja i tako ćemo, ukratko ali zaokrugljeno, prezentovati osnovne ideje kvantne statističke fizike, kako se naziva uopštenje kvantne mehanike na mešano stanje.

4.3.1 Mešano stanje

Sa opštim pojmom mešanog statističkog ansambla, koji obuhvata nehomogene i homogene ansamble, upoznali smo se u § 1.4.12. U slučaju kvantnih sistema, mešani ansambl se dobija mešanjem homogenih kvantnih ansambala. U analogiji sa specijalnim slučajem čistih ansambala, mešani kvantni ansambl zvaćemo kratko *mešanim stanjem*. Ako su od pomešanih čistih stanja bar dva različita (neekvivalentna), onda imamo nehomogeno ili mešano stanje u užem smislu. Inače imamo trivijalno mešano stanje, tj. čisto stanje.

Nameće se pitanje da li postoje pogodni matematički objekti u Hilbert-ovom prostoru stanja, kojima bismo mogli na jednostavan način da opisujemo mešana stanja. Ako takvi entiteti postoje, onda moramo utvrditi:

1) kako se iz njih izračunavaju verovatnoće rezultata merenja;

2) kako se iz njih izračunavaju srednje vrednosti opservabli;

3) kako se ti objekti menjaju u vremenu;

4) kako se ti objekti menjaju pri merenju.

4.3.2 Pojam verovatnoće kao putokaz

Pretpostavimo da imamo K čistih kvantnih ansambala sa po N_k, $k = 1, 2, \ldots, K$, kvantnih sistema u njima i pretpostavimo da smo sve to ujedinili (pomešali) u jedan jedini nadansambl od $N \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^{K} N_k$ sistema, koji je naše mešano stanje.

Neka je data jedna opservabla $\hat{A}$ i jedna njena diskretna svojstvena vrednost a_n. Znamo da izračunamo verovatnoću $v_{n,k}$ da pri merenju $\hat{A}$ dobijemo a_n u čistom stanju k. Pitamo se kolika je verovatnoća v_n istog kvantnog događaja u našem mešanom stanju.

Tražena verovatnoća v_n je po samoj definiciji verovatnoće iz § 1.4.5, s tačnošću do limesa, jednaka relativnoj frekvenciji $\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{K} n_k$, gde je n_k broj kvantnih sistema u k-tom čistom stanju u kojima se događaj desio:

$$v_n = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{K} n_k = \lim_{N\to\infty}\sum_{k=1}^{K}\frac{N_k}{N}\frac{n_k}{N_k} = \sum_{k=1}^{K}\lim_{N\to\infty}\frac{N_k}{N}\lim_{N_k\to\infty}\frac{n_k}{N_k}. \tag{4.3.1}$$

U poslednjem koraku smo se koristili činjenicom da $N = \sum_k N_k \to \infty$, tako što svaki sabirak $N_k \to \infty$, jer i u podansamblima $k = 1, \ldots, K$ broj sistema mora da teži beskonačnosti (da bismo mogli preći sa relativnih frekvenci na verovatnoće). Odnosi $\frac{N_k}{N} \stackrel{\text{def}}{=} w_k$, tzv. *statističke težine*[4.3.1], ostaju nepromenjeni pri $N_k \to \infty$, $\forall k$ (to je deo definicije pojma mešanja, uporediti sa § 1.4.12), tako da je $\lim_{N\to\infty}\frac{N_k}{N} = w_k$.

Na taj način smo izveli formulu od velikog značaja:

$$\boxed{v_n = \sum_{k=1}^{K} w_k v_{n,k}} \tag{4.3.2}$$

(jer je $v_{n,k} = \lim_{N_k\to\infty}\frac{n_k}{N_k}$), koja iskazuje da je verovatnoća u mešanom stanju jednaka usrednjenim verovatnoćama u čistim stanjima koja su pomešana.

4.3.3 Statistički operatori

Sada možemo pristupiti traženju matematičkih objekata koji mogu da posluže za opisivanje mešanih stanja. Neka su $|\,\psi_k\,\rangle \in \mathcal{H}$, $k = 1, 2, \ldots, K$, stanja koja su implicitno figurisala u prethodnom odeljku.

Podsetimo se da smo u postulatu o verovatnoći imali jednakosti

$$v_{n,k} \stackrel{\text{def}}{=} v(a_n, \hat{A}, \psi_k) = \langle \psi_k \mid P_n \mid \psi_k\,\rangle = \|\hat{P}_n\psi_k\|^2, \tag{4.3.3}$$

gde je P_n svojstveni projektor od $\hat{A}$, koji odgovara diskretnoj svojstvenoj vrednosti a_n. Vidimo da nas nikud ne bi dovelo prosto zamenjivanje poslednjeg ili predposlednjeg izraza iz (4.3.3) u (4.3.2). Potrebna je izvesna izmena u formuli za verovatnoću, koja će, na neki način, kvadratnu zavisnost od ψ_k pretvoriti u linearnu zavisnost.

Lema 4.3.1 *Verovatnoća određenog mernog rezultata može da se piše i u vidu*

$$v(a_n, \hat{A}, \psi_k) = \mathrm{Tr}\,\mid \psi_k\,\rangle\langle\psi_k \mid \hat{P}_n, \tag{4.3.4}$$

*gde "*Tr *" označava trag operatora.*

[4.3.1] Statističke težine se obeležavaju sa w_k, po engleskoj reči *weight* (Čitati: vejt), težina.

Dokaz: Za izračunavanje desne strane od (4.3.4) uzmimo bazis $\{|\,\psi_1\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\,\psi_k\,\rangle, \ldots |\,\psi_i\,\rangle \ldots \mid i = 2,3,\ldots\} \subset \mathcal{H}$. Odmah sledi da je desna strana: DS $= \sum_i \langle \psi_i \mid (|\,\psi_k\,\rangle\langle\psi_k\,|)\hat{P}_n \mid \psi_i\,\rangle = \langle \psi_k \mid \hat{P}_n \mid \psi_k\,\rangle = v_{n,k}$. *Q. E. D.*

Zamenjujući (4.3.4) u (4.3.2) dolazimo do jednakosti

$$v_n = \sum_k w_k \mathrm{Tr}\ |\,\psi_k\,\rangle\langle\psi_k \mid \hat{P}_n = \mathrm{Tr}\,(\sum_k w_k \mid \psi_k\,\rangle\langle\psi_k\,|)\hat{P}_n, \tag{4.3.5}$$

iz čega sledi da je traženi matematički objekat operator[4.3.2]: $\hat{\rho} = \sum_k w_k \mid \psi_k\,\rangle\langle\psi_k\,|$.

Proučimo osobine ovog entiteta. Očigledno je $\hat{\rho}$ linearni operator u $\mathcal{H}$. Iz $w_k = \frac{N_k}{N}$ i $N = \sum_k N_k$ sledi $w_k > 0$, $\forall k$, $\sum_k w_k = 1$, a to su osobine koje karakterišu distribuciju verovatnoće (uporediti 1.4.1).

Za proizvoljni vektor $|\,\varphi\,\rangle \in \mathcal{H}$ imamo

$$\langle\varphi \mid \hat{\rho} \mid \varphi\,\rangle = \langle\varphi \mid (\sum_k w_k \mid \psi_k\,\rangle\langle\psi_k\,|) \mid \varphi\,\rangle = \sum_k w_k |\langle\, \varphi \mid \psi_k\rangle|^2 \geq 0. \tag{4.3.6}$$

Poznato je da se operator $\hat{A}$ koji ima osobinu da je njegova očekivana vrednost uvek nenegativna, $\langle\varphi \mid \hat{A} \mid \varphi\rangle \geq 0,\ \forall \mid \varphi\,\rangle \in \hat{H}$, zove *pozitivni* operator (po starijoj terminologiji se zove pozitivno semidefinitni operator[4.3.3]). Najzad, $\mathrm{Tr}\,\sum_k w_k \mid \psi_k\,\rangle\langle\psi_k \,|= \sum_k w_k \mathrm{Tr}\ |\,\psi_k\,\rangle\langle\psi_k\,|= \sum_k w_k = 1$. Dakle, radi se o *pozitivnom operatoru, jediničnog traga*, koji je i svugde definisan (u $\mathcal{H}$).

Našavši potrebne uslove za naš entitet, moramo se osvedočiti da su oni i dovoljni. U tome će nam pomoći sledeći stav, koji se dokazuje u teoriji Hilbert-ovih prostora.

Stav 4.3.1 *Svaki svugde definisan pozitivni operator $\hat{\rho}$ jediničnog traga ima čisto diskretan spektar.*

Neka je $\hat{\rho}$ proizvoljan svugde definisani pozitivan operator jediničnog traga. Na osnovu Stava S 4.3.1 spektralna forma ovog operatora može da se piše u vidu

$$\boxed{\hat{\rho} = \sum_n r_n \mid \chi_n\,\rangle\langle\chi_n\,|} \tag{4.3.7}$$

(može biti i više jednakih r_n za različite n). Naravno, $\langle\, \chi_n \mid \chi_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$ i $\sum_n \mid \chi_n\,\rangle\langle\chi_n\,|= \hat{I}$.

Zbog $\langle\chi_n \mid \hat{\rho} \mid \chi_n\,\rangle = r_n \geq 0$, $\forall n$, i $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = \sum_n r_n = 1$, sve svojstvene vrednosti r_n od $\hat{\rho}$ pripadaju intervalu $[0,1]$ i sabiraju se u jedinicu. To je potreban i dovoljan uslov za distribucije verovatnoće ili statističke težine. Prema tome, (4.3.7) možemo interpretirati tako da se $\hat{\rho}$ može dobiti *mešanjem* stanja $|\,\chi_n\rangle$, $n = 1,2,\ldots$, a r_n da su odgovarajuće statističke težine. (Pri tome je praktično ispustiti sabirke sa $r_n = 0$.)

Na osnovu Stava S 4.3.1, formule (4.3.7) i njenih posledica vidimo da su svugde definisani pozitivni operatori $\hat{\rho}$ jediničnog traga upravo entiteti koje tražimo. To su tzv. *statistički operatori* ili *matrice gustine* (razlog za ovaj sinonim videti niže u primedbi 4.3.7).

Na kraju paragrafa, možemo konstatovati da se svaki statistički operator može napisati u vidu $\hat{\rho} = \sum_k w_k \mid \psi_k\rangle\langle\psi_k\,|$, kao gore. Pri tome pomešana stanja $|\,\psi_k\rangle$ mogu i ne moraju biti ortogonalna

[4.3.2] Često se umesto $\sum_k w_k \mid \psi_k\,\rangle\langle\psi_k\mid$ piše $\sum_k \mid \psi_k\,\rangle w_k \langle\psi_k\,|$.

[4.3.3] Ako je $\langle\varphi \mid \hat{A} \mid \varphi\,\rangle > 0,\ \forall \mid \varphi\,\rangle \in \hat{H}$, kaže se da je $\hat{A}$ striktno pozitivan, po starijoj terminologiji pozitivno definitan. Treba napomenuti da se u kvantno-mehaničkoj literaturi često koristi samo termin "pozitivno definitan" za slučaj sa "$\geq$" kao i sa "$>$".

(kao u (4.3.7)). Čitaocu je verovatno očigledno da, strogo govoreći, fizičku interpretaciju (entiteta u formalizmu koji predstavlja mešano stanje) imaju samo statistički operatori sa konačno mnogo različitih pozitivnih svojstvenih vrednosti, jer se u laboratoriji može pomešati samo konačno mnogo čistih ansambala. Radi matematičke zaokrugljenosti radimo sa klasom svih statističkih operatora[4.3.4,4.3.5] u $\hat{H}$.

4.3.4 Kvantna statistička fizika i izračunavanje verovatnoća

Kao što smo do sada imali mnogo prilika da se ubedimo, kvantna mehanika ima dva osnovna objekta: čisto stanje i opservablu. Grana fizike u kojoj se mešano stanje pojavljuje umesto čistog stanja naziva se *kvantna statistička fizika.* Analogno, u klasičnoj statističkoj fizici se proučavaju mešani ansambli klasičnih sistema.

Na osnovu rezultata prethodnog paragrafa, sada smo u stanju da formulišemo dva (već dokazana) teorema koji predstavljaju kvantno-statističke pandane Postulatu I (o stanjima), odnosno Postulatu III (o verovatnoćama).

Teorem 4.3.1 *Svako mešano stanje opisuje se nekim statističkim operatorom u prostoru stanja $\hat{H}$ i obratno, svaki statistički operator u $\hat{H}$ u principu opisuje neko mešano stanje.*

Na osnovu ovog Teorema, upotrebljavaćemo termine "statistički operator" i "mešano stanje" kao sinonime.

Teorem 4.3.2 *Verovatnoća $v([a,b],\hat{A},\hat{\rho})$ da se dobije rezultat iz unapred zadatog intervala $[a,b]$ pri merenju opservable $\hat{A}$ u mešanom stanju $\hat{\rho}$ izračunava se po formuli*

$$\boxed{v([a,b],\hat{A},\hat{\rho}) = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{P}_{[a,b]}(\hat{A})}, \tag{4.3.8}$$

gde je $\hat{P}_{[a,b]}(\hat{A})$ spektralna mera intervala $[a,b]$ po opservabli $\hat{A}$ (definisana je sa (2.1.4) za čisto diskretan spektar, a sa (2.3.17) u opštem slučaju)[4.3.6].

Vratimo se Teoremu T 4.3.1, koji, iako jednostavan, iziskuje dve napomene. Statistički operator $\hat{\rho}$ je jednoznačno određen kad je dat mešani kvantni ansambl, za razliku od vektora stanja, koji je određen s tačnošću do faznog faktora kad je dat čist ansambl. Obratno, ako je dat statistički operator $\hat{\rho}$, čista stanja koja su pomešana u dotičnom mešanom stanju *nisu data jednoznačno.* Ali na osnovu Teorema T 4.3.1 i T 4.3.2 dva mešana stanja se smatraju *jednakim* u kvantnoj statističkoj fizici ako i samo ako se opisuju istim statističkim operatorom $\hat{\rho}$.

[4.3.4*] U stvari, kao što ćemo se uveriti u sledećem odeljku, i statistički operatori sa beskonačno mnogo različitih pozitivnih svojstvenih vrednosti imaju fizičkog smisla pri opisivanju podsistema složenih sistema u čistom korelisanom stanju (uporediti korolar K 4.4.1).

[4.3.5*] Čitalac se možda pita ne može li se $\hat{\rho}$ sa beskonačno mnogo različitih svojstvenih vrednosti predstaviti kao mešavina, tj. $\hat{\rho} = \sum_k w_k \mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid$, konačno mnogo neortogonalnih stanja $\mid \psi_k \rangle$. Odgovor je "ne", jer se može pokazati da skup $\{\mid \psi_k \rangle \mid \forall k\}$ pomenutih vektora obrazuje oblast likova od $\hat{\rho}$. A pomenuti $\hat{\rho}$ očigledno ima beskonačno-dimenzionalnu oblast likova (nju obrazuju $\mid \chi_n \rangle$-ovi u (4.3.7)).

[4.3.6] Podsetimo se da se pod tragom mogu vršiti ciklične permutacije operatora. Prema tome, desna strana od (4.3.8) bi mogla takođe da glasi $\mathrm{Tr}\,\hat{P}_{[a,b]}(\hat{A})\hat{\rho}$. Podsetimo se takođe da se u Postulatu III (pa prema tome i u teoremu T 4.3.2) zatvoreni interval može zameniti intervalom bilo kog drugog tipa.

Zadatak 4.3.1 Neka su $|\,\psi_1\,\rangle$ i $|\,\psi_2\,\rangle$ dva ortogonalna stanja i neka je $\hat{\rho} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}\,|\,\psi_1\,\rangle\langle\psi_1\,| + \frac{1}{2}\,|\,\psi_2\,\rangle\langle\psi_2\,|$. Pokazati da ma koja druga dva ortogonalna stanja $|\,\varphi_1\,\rangle$ i $|\,\varphi_2\,\rangle$, ako obrazuju isti potprostor kao $|\,\psi_1\,\rangle$ i $|\,\psi_2\,\rangle$, i ako se pomešaju na isti način, $\hat{\rho}' = \frac{1}{2}\,|\,\varphi_1\,\rangle\langle\varphi_1\,| + \frac{1}{2}\,|\,\varphi_2\,\rangle\langle\varphi_2\,|$, daju isto mešano stanje, tj. $\hat{\rho}' = \hat{\rho}$.

Neka je $|\,\psi_1\,\rangle$ iz prethodnog Zadatka stanje linearne polarizacije fotona duž x-ose, a $|\,\psi_2\,\rangle$ neka je analogno stanje duž y-ose (foton se prostire duž z-ose). Neka su $|\,\varphi_1\,\rangle$ i $|\,\varphi_2\,\rangle$ analogna stanja linearne polarisanosti fotona duž x'-, odnosno y'-ose ($z' = z$), pri čemu je koordinatni sistem zarotiran oko z-ose za neki ugao. Operator $\hat{\rho} = \hat{\rho}'$ iz Zadatka, u ovom slučaju, opisuje mešano stanje *potpune nepolarisanosti*, kada foton "ništa ne zna" o našem izboru x- i y-ose.

Postulati II i V (o opservablama, odnosno o kvantizaciji) zajednički su za kvantnu mehaniku i kvantnu statističku fiziku. Isto važi za Postulat IV (o pojedinačnim kvantnim sistemima). Posledica Postulata VI (o zakonu kretanja) biće proučena u § 4.3.7.

Zadatak 4.3.2 Pokazati preciznim rezonovanjen da je oštra vrednost a_n opservable $\hat{A}$ u mešanom stanju $\hat{\rho}$ ekvivalentna tome da svaki pojedinačni kvantni sistem u ansamblu $\hat{\rho}$ ima vrednost a_n od $\hat{A}$.

Zadatak 4.3.3 Dokazati pomoću razlaganja (4.3.7) statističkog operatora da selektivno prediktivno merenje nedegenerisane svojstvene vrednosti a_m opservable $\hat{A}$ (ili nedegenerisanog niza svojstvenih vrednosti $a_1, a_2, \ldots, a_P$ kompletnog skupa kompatibilnih opservabli $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \ldots, \hat{A}_P$) nužno daje čisti kvantni ansambl opisan svojstvenim vektorom $|\,m\,\rangle$ (odnosno $|\,a_1 \ldots a_P\,\rangle$), koji odgovara svojstvenoj vrednosti a_m od $\hat{A}$ (odnosno $a_1, \ldots, a_P$ od $\hat{A}_1, \ldots, \hat{A}_P$). U stvari treba elaborirati dokaz teorema T 2.4.1.

Vredno je posebno istaći dva ekstremna slučaja od (4.3.8). Neka je a_n *nedegenerisana diskretna svojstvena vrednost* od $\hat{A}$. Onda verovatnoća da se dobije određeni rezultat a_n pri merenju opservable $\hat{A}$ u stanju $\hat{\rho}$ sledi iz (4.3.8), stavljajući umesto $[a, b]$ interval $[a_n, a_n]$. Projektor $\hat{P}[a, b](\hat{A})$ se svodi na $|\,a_n\,\rangle\langle a_n\,|$, gde je, naravno, $\hat{A}\,|\,a_n\,\rangle = a_n\,|\,a_n\,\rangle$. Stoga je

$$\boxed{v(a_n, \hat{A}, \hat{\rho}) = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\,|\,a_n\,\rangle\langle a_n\,| = \langle a_n\,|\,\hat{\rho}\,|\,a_n\,\rangle} \tag{4.3.9}$$

(poslednji korak može da se vidi analogno kao u dokazu leme L 4.3.1).

Zadatak 4.3.4 Ako je a_n *degenerisana* diskretna svojstvena vrednost od $\hat{A}$ sa $\hat{P}_n$ kao odgovarajućim svojstvenim projektorom, pokazati da se (4.3.8) svodi na

$$v(a_n, \hat{A}, \hat{\rho}) = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{P}_n. \tag{4.3.10}$$

Drugi ekstremni slučaj imamo kad interval $[a, b]$ pripada samo kontinualnom spektru opservable $\hat{A}$, tako da je $\hat{P}_{[a,b]}(\hat{A}) = \int_a^b |\,s\,\rangle\,\mathrm{d}s\langle s\,|$, gde su $|\,s\,\rangle\langle s\,|$ uopšteni svojstveni projektori od $\hat{A}$, koji odgovaraju kontinualnim svojstvenim vrednostima $s \in [a, b]$. Onda se (4.3.8) svodi na

$$\boxed{v([a, b], \hat{A}, \hat{\rho}) = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\int_a^b |\,s\,\rangle\,\mathrm{d}s\langle s\,| = \int_a^b \langle s\,|\,\hat{\rho}\,|\,s\,\rangle\,\mathrm{d}s}. \tag{4.3.11}$$

Kao i u slučaju čistog stanja (uporediti (2.3.18)), izraz

$$\rho(s, \hat{A}, \hat{\rho}) \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\,|\,s\,\rangle\langle s\,| = \langle s\,|\,\hat{\rho}\,|\,s\,\rangle \tag{4.3.12}$$

interpretira se kao *gustina verovatnoće*[4.3.7].

[4.3.7] Sad možemo razumeti zašto se statistički operator $\hat{\rho}$ naziva i matricom gustine. Naime, izračunavanja se obično vrše u nekoj reprezentaciji, tako da $\hat{\rho}$ postaje matrica ρ. Ako je to, na primer, koordinatna reprezentacija (koja se najčešće koristi), onda se, na primer, za jednu česticu pojavljuju kontinualni matrični elementi $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle\,\mathbf{r}\,|\,\hat{\rho}\,|\,\mathbf{r}'\,\rangle$ od matrice ρ. Pri tome dijagonalni elementi $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ imaju, na osnovu (4.3.11), fizički smisao gustine verovatnoće nalaženja čestice oko $\mathbf{r}$.

4.3.5 Kvantna mehanika kao podoblast kvantne statističke fizike

Kao što smo videli u paragrafu § 4.3.1, mešana stanja se definišu inkluzivno, tj. obuhvataju kako mešana stanja u užem smislu tako i čista stanja. Prema tome, i kvantna mehanika, kao nauka o čistim stanjima, mora biti podoblast kvantne statističke fizike, nauke o mešanim stanjima.

Sledeća dva kriterijuma pomažu nam da prepoznamo čista stanja, opisana projektorima pravaca $| \psi \rangle\langle \psi |$, u kontekstu mešanih stanja, opisanih statističkim operatorima $\hat{\rho}$.

Teorem 4.3.3 *Mešano stanje $\hat{\rho}$ je čisto stanje ako i samo ako je operator $\hat{\rho}$ idempotentan:*

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}. \tag{4.3.13}$$

Dokaz: *Potrebnost* je očigledna (svaki projektor, pa i projektor pravca, je idempotentan). *Dovoljnost* sledi iz toga što su svojstvene vrednosti $\hat{\rho}$ (projektor) 1 ili 0; kako mu je trag 1, ima jednu svojstvenu vrednost 1, a ostale 0. *Q. E. D.*

Zadatak 4.3.5 Pokazati da je mešano stanje $\hat{\rho}$ u stvari čisto stanje ako i samo ako je

$$\mathrm{Tr}\, \hat{\rho}^2 = 1. \tag{4.3.14}$$

Zadatak 4.3.6 Pokazati da se osnovna formula (4.3.8) u slučaju čistog stanja $\hat{\rho} = | \psi \rangle\langle \psi |$ svodi na formulu $v([a,b], \hat{A}, \psi) = ||\hat{P}_{[a,b]}(\hat{A})||^2$ iz Postulata III.

4.3.6 Srednja vrednost

Vratimo se našem programu izloženom u paragrafu § 4.3.1 i uočimo da je na redu tačka 2).

Teorem 4.3.4 *Srednja vrednost proizvoljne opservable $\hat{A}$ u proizvoljnom mešanom stanju $\hat{\rho}$ izračunava se po formuli*

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\hat{A}}. \tag{4.3.15}$$

Dokaz: Kao što znamo, najopštija opservabla $\hat{A}$ ima spektralnu formu koja glasi $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n + \int_p^t | s \rangle s \langle s | \,\mathrm{d}s$ (videti (2.3.14)). A rezultati merenja, kao što nam je takođe poznato, mogu biti samo diskretne svojstvene vrednosti a_n, $\forall n$ i intervali iz kontinualnog spektra $[p,t]$. Srednja vrednost $\langle \hat{A} \rangle$ je onda, po samoj suštini tog pojma (videti (1.4.6*b*) i (1.4.7)):

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n a_n v(a_n, \hat{A}, \hat{\rho}) + \int_p^t s\, \rho(s, \hat{A}, \hat{\rho})\, \mathrm{d}s. \tag{4.3.16}$$

Formula (4.3.10) daje $v(a_n, \hat{A}, \hat{\rho}) = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\hat{P}_n$, a iz (4.3.12) imamo $\rho(s, \hat{A}, \hat{\rho}) = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho} \,| s \rangle\langle s |$. Kad to zamenimo u (4.3.16), dolazimo do jednakosti $\langle \hat{A} \rangle = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}(\sum_n a_n \hat{P}_n + \int_p^t | s \rangle s \langle s | \,\mathrm{d}s) = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\hat{A}$. *Q. E. D.*

Zadatak 4.3.7 Pokazati da se opšta formula (4.3.15) svodi na $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ ako $\hat{\rho} = | \psi \rangle\langle \psi |$, tj. ako: je $\hat{\rho}$ čisto stanje.

***Napomena* 4.3.1** *U klasičnoj mehanici jedne čestice, na primer, analogon statističkog operatora $\hat{\rho}$ je (nenegativna) gustina verovatnoće $\rho(\mathbf{r},\mathbf{p})$, normirana na 1 u faznom prostoru: $\int\int \rho(\mathbf{r},\mathbf{p})\,\mathrm{d}\mathbf{r}\,\mathrm{d}\mathbf{p} = 1$. Za klasičnu varijablu $A(\mathbf{r},\mathbf{p})$ imamo analogon formule (4.3.15) u vidu $\overline{A} = \int\int \rho(\mathbf{r},\mathbf{p})A(\mathbf{r},\mathbf{p})\,\mathrm{d}\mathbf{r}\,\mathrm{d}\mathbf{p}$. Klasičan analogon spektralne mere intervala, tj. projektora $\hat{P}_{[a,b]}(\hat{A})$, je tzv. karakteristična funkcija $\omega^{(A)}_{[a,b]}(\mathbf{r},\mathbf{p})$, koja je po definiciji jednaka 1 u svakoj tački faznog prostora u kojoj vrednost varijable $A(\mathbf{r},\mathbf{p})$ pripada intervalu $[a,b]$, inače je nula. Onda je $v([a,b],A,\rho) = \int\int \rho(\mathbf{r},\mathbf{p})\omega^{(A)}_{[a,b]}\,\mathrm{d}\mathbf{r}\,\mathrm{d}\mathbf{p}$. Kao što vidimo, formalna sličnost kvantno-statističkih formula sa klasičnim pandanima je veća nego sličnost osnovnih kvantno-mehaničkih formula sa odgovarajućim klasičnim jednakostima.*

4.3.7 Vremenska evolucija

U rešavanju tačke 3) iz paragrafa § 4.3.1 odlučićemo se za Schrödinger-ovu sliku. Onda, kao što znamo, $\mid \psi(t)\,\rangle = \hat{U}(t-t_0,t_0) \mid \psi(t_0)\,\rangle$ ili za braove $\langle\psi(t)\mid = \langle\psi(t_0)\mid \hat{U}^\dagger(t-t_0,t_0)$. Pošto u svakom trenutku t mešavinu čistih stanja opisuje statistički operator, tj. $\hat{\rho}(t) = \sum_k w_k \mid \psi_k(t)\,\rangle\langle\psi_k(t)\mid$, očigledno sledi

$$\boxed{\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t-t_0,t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^\dagger(t-t_0,t_0)}. \tag{4.3.17}$$

Postavlja se pitanje kako glasi diferencijalni vid zakona kretanja za statistički operator. Analogan problem smo rešavali kada smo izvodili diferencijalni vid kvantno-mehaničkog zakona kretanja u Heisenberg-ovoj slici, (3.3.5a). Analognim rezonovanjem proizlazi

$$\boxed{\imath\hbar\tfrac{d\hat{\rho}(t)}{\mathrm{d}t} = [\ \hat{H}(t),\hat{\rho}(t)\ ]}. \tag{4.3.18}$$

Zadatak 4.3.8 Pokazati da se za konzervativni sistem (4.3.18) može dobiti na osnovu (4.3.17), kao formalni specijalni slučaj pomenutog zakona kretanja (3.3.5a), ako pretpostavimo da je $\hat{\rho}(t)$ opservabla u Heisenberg-ovoj slici, koja u Schrödinger-ovoj slici ne zavisi od vremena.

Zadatak 4.3.9 Pokazati da pri vremenskoj evoluciji čisto stanje uvek ostaje čisto, a mešano u užem smislu ostaje nehomogeno.

4.3.8 Promena mešanog stanja pri merenju

Rešenje tačke 4) iz paragrafa § 4.3.1 formulisaćemo u sledećem teoremu.

Teorem 4.3.5 *Neka je $\hat{\rho}$ proizvoljno mešano stanje, a $\hat{A}$ proizvoljna opservabla sa čisto diskretnim spektrom*[4.3.8]*, koja ima spektralnu formu $\hat{A} = \sum_n a_n\hat{P}_n$ $(n \neq n' \Rightarrow a_n \neq a_{n'})$. Idealno selektivno merenje svojstvene vrednosti a_n, $n = 1,2,\ldots$ opservable $\hat{A}$ prevodi $\hat{\rho}$ u mešano stanje*

$$\hat{\rho}'_n = \frac{\hat{P}_n\hat{\rho}\hat{P}_n}{\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{P}_n} \tag{4.3.19}$$

[4.3.8] Ako merimo tačne vrednosti opservable $\hat{A}$ neselektivnim merenjem, onda opservabla mora imati čisto diskretan spektar; drugim rečima, što se egzaktnog merenja tiče, ovo je najopštiji slučaj opservable. Kao što znamo (§ 2.3.3), u kontinualnom spektru neke opservable $\hat{B}$ možemo da vršimo samo merenja intervala. Za svako takvo merenje nije teško konstruisati iz $\hat{B}$ opservablu sa čisto diskretnim spektrom na čije tačno merenje se svodi pomenuto intervalno merenje od $\hat{B}$ (po želji, videti str. 220 u knjizi von Neumann-a, referenca u 2.5.4).

ako je $v(a_n, \hat{A}, \hat{\rho}) > 0$. Za razliku od toga, neselektivno prediktivno merenje izaziva sledeću promenu stanja:

$$\hat{\rho} \to \hat{\rho}' = \sum_n \hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n. \tag{4.3.20}$$

Dokaz: Dat u Dodatku § 4.3.11; mada je u svakom koraku elementaran, sve skupa je dosta složen. *Q. E. D.*

Zadatak 4.3.10 *

a) Dokazati da su operatori $\hat{\rho}'_n$ iz (4.3.19) i $\hat{\rho}'$ iz (4.3.20) statistički operatori.

b) Dokazati da u prvom od njih ansambl ima oštru vrednost a_n opservable $\hat{A}$.

c) Dati fizičku interpretaciju identiteta $\sum_n \hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n = \sum'_n \mathrm{Tr}\,(\hat{\rho}\hat{P}_n) \frac{\hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n}{\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{P}_n}$ (prim znači da na desnoj strani sumiramo po indeksima za koje je $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{P}_n > 0$).

Zadatak 4.3.11 * Neka je projektor $\hat{P}$ opservabla kompatibilna sa merenom opservablom $\hat{A}$ i neka mešano stanje $\hat{\rho}$ ima oštru vrednost 1 od $\hat{P}$.

a) Pokazati da stanje $\hat{\rho}'$ iz (4.3.20) i stanje $\hat{\rho}'_n$ iz (4.3.19) imaju takođe istu oštru vrednost.

b) Interpretirati rezultat pod a) kao i rezultate pod b) i c) u prethodnom zadatku u kontekstu formula (4.3.19) i (4.3.20), definicije D 2.4.1 pojma prediktivnog merenja, kao i pojma selektivnog i neselektivnog merenja iz paragrafa § 1.4.14.

Zadatak 4.3.12 * Pokazati da se mešano stanje $\hat{\rho}$ *ne menja* pri neselektivnom prediktivnom merenju opservable $\hat{A}$ ako i samo ako važi

$$[\,\hat{\rho}, \hat{A}\,] = 0, \tag{4.3.21}$$

tj. ako je, kao što se kaže, stanje kompatibilno sa merenom opservablom. (Indikacija: Koristiti stav S 2.4.2.)

Zadatak 4.3.13 Na koje prostije formule se svode (4.3.19) i (4.3.20) ako je spektar opservable $\hat{A}$ prost?

Zadatak 4.3.14 Neka su projektori $\hat{P}_1$ i $\hat{P}_2$ kompatibilni kvantni događaji, tj. $[\,\hat{P}_1, \hat{P}_2\,] = 0$. Pokazati da za proizvoljno mešano stanje $\hat{\rho}$ važi

$$v(1, \hat{P}_1\hat{P}_2, \hat{\rho}) = v(1, \hat{P}_1, \hat{\rho}) v(1, \hat{P}_2, \hat{\rho}'_1), \tag{4.3.22}$$

ako je $\hat{\rho}'_1 = \frac{\hat{P}_1 \hat{\rho} \hat{P}_1}{\mathrm{Tr}\,(\hat{\rho}\hat{P}_1)}$ stanje u koje $\hat{\rho}$ prelazi pri idealnom selektivnom merenju vrednosti 1 od $\hat{P}_1$ (pod pretpostavkom da je $v(1, \hat{P}_1, \hat{\rho}) > 0$). Poslednja verovatnoća u (4.3.22) je *uslovna verovatnoća*, a (4.3.22) je uopštenje formule (2.4.12) na mešano stanje.

Zadatak 4.3.15 Pokazati da iz $\hat{P}_2 \leq \hat{P}_1$ sledi:

$$v(1, \hat{P}_2, \hat{\rho}) = v(1, \hat{P}_1, \hat{\rho}) v(1, \hat{P}_2, \hat{\rho}'_1), \tag{4.3.23}$$

gde je $\hat{\rho}$ proizvoljno mešano stanje, a $\hat{\rho}'_1$ isto što i u prethodnom Zadatku. Izraz (4.3.23) je uopštenje formule (2.4.13) na mešano stanje.

4.3.9 Entropija kao mera nedovoljnog poznavanja sistema

Videli smo u paragrafu § 2.1.1 da čisto stanje predstavlja maksimalno moguće precizno poznavanje trenutnih osobina kvantnog sistema (bar za kvantnog fizičara). Međutim, u mešanom stanju u užem smislu ne znamo u kojem se od pomešanih čistih stanja pojedinačni sistem nalazi; čak ne znamo ni koja su čista stanja pomešana, § 4.3.4. Dakle, u mešanom stanju se pojavljuje jedan subjektivni moment: opserver nedovoljno poznaje trenutne osobine kvantnog sistema.

Kao kvantitativna mera nedovoljnog poznavanja sistema obično se uzima tzv. *entropija*:

$$S \stackrel{\text{def}}{=} -k\text{Tr}\,(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}), \tag{4.3.24}$$

gde je k Boltzmann-ova konstanta.

Ako statistički operator $\hat{\rho}$ izrazimo u spektralnoj formi (4.3.7) i izračunavanje traga izvršimo u svojstvenom bazisu $\{\mid \chi_n\,\rangle \mid \forall n\}$ od $\hat{\rho}$, onda (4.3.24) prelazi u

$$S = -k\sum_n r_n \ln r_n \tag{4.3.25}$$

(za $r_n = 0$, $\ln r_n$ nije definisano, ali zbog nultosti prvog faktora u sabirku, to i nije važno, sabirak je svakako nula).

Zadatak 4.3.16 Pokazati da je u slučaju čistog stanja entropija nula, a inače pozitivna.

4.3.10 Kanonički ansambl

Kada je kvantni sistem u *termodinamičkoj ravnoteži* sa okolinom na temperaturi T, onda je njegovo stanje mešano, naziva se *kanonički ansambl* (kao i u klasičnoj fizici) i glasi

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z(T)}e^{-\frac{\hat{H}}{kT}}, \tag{4.3.26}$$

gde je $Z(T)$ konstanta normalizacije, $\hat{H}$ hamiltonijan sistema, a k Boltzmann-ova konstanta.

Iz $\text{Tr}\,\hat{\rho} = 1$ sledi

$$Z(T) = \text{Tr}\,e^{-\frac{\hat{H}}{kT}}. \tag{4.3.27}$$

$Z(T)$ je tzv. *particiona funkcija* ili *statistička suma*. U mnogim važnim formulama statističke fizike particiona funkcija u izvesnoj meri preuzima ulogu statističkog operatora pošto je prostiji objekat: brojna funkcija temperature.

Zadatak 4.3.17 Neka $\hat{H}$ ima prost, čisto diskretan spektar sa spektralnom formom $\hat{H} = \sum_n E_n \mid \psi_n\,\rangle\langle\psi_n \mid$. Pokazati da je tada $Z(T) = \sum_n \exp(-\frac{E_n}{kT})$ i $\hat{\rho} = \frac{1}{Z(T)}\sum_n \exp(-\frac{E_n}{kT}) \mid \psi_n\,\rangle\langle\psi_n \mid$. Kako se u tom slučaju mogu konkretnije napisati izrazi (4.3.26) i (4.3.27)?

4.3.11 * Dodatak — dokaz teorema 5

U teoremu T 2.4.4 smo videli da čisto stanje $\mid \psi \rangle$ pri idealnom selektivnom merenju a_n od $\hat{A}$ prelazi u čisto stanje:

$$\frac{1}{\sqrt{\langle \psi \mid \hat{P}_n \mid \psi \rangle}} \hat{P}_n \mid \psi \rangle, \tag{4.3.28}$$

ako je $v(a_n, \hat{A}, \mid \psi \rangle) > 0$. To je bila posledica definicije D 2.4.1 idealnog merenja.

Izraz (4.3.19) i desnu stranu od (4.3.20) izvešćemo iz (4.3.28) i to obrnutim redom: prvo (4.3.20), pa (4.3.19).

Napišimo $\hat{\rho}$ kao smešu čistih stanja $\hat{\rho} = \sum_k w_k \mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid$. Neka tome odgovara razlaganje ansambla od N sistema (koji je opisan sa $\hat{\rho}$) na čiste podansamble sa po N_k sistema (opisanih sa $\mid \psi_k \rangle$), $k = 1, 2, \ldots$, tako da imamo $N = \sum_k N_k$. Na osnovu (4.3.28) znamo da će k-ti čisti podansambl pri selektivnom merenju a_n od $\hat{A}$ preći u stanje $\frac{\hat{P}_n \mid \psi_k \rangle}{\sqrt{\langle \psi_k \mid \hat{P}_n \mid \psi_k \rangle}}$ ako je $v(a_n, \hat{A}, \psi_k) = \langle \psi_k \mid \hat{P}_n \mid \psi_k \rangle > 0$. Na jeziku statističkih operatora možemo napisati da u ovom slučaju $\mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid$ prelazi u

$$\frac{\hat{P}_n \mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid \hat{P}_n}{\langle \psi_k \mid \hat{P}_n \mid \psi_k \rangle}. \tag{4.3.29}$$

Kao sledeće, izračunajmo kako se u neselektivnom merenju opservable $\hat{A}$ menja čisto stanje $\mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid$. Pošto je $\langle \psi_k \mid \hat{P}_n \mid \psi_k \rangle = v(a_n, \hat{A}, \psi_k)$, to je istovremeno i statistička težina podansambla (4.3.29) (koji ima oštru vrednost a_n od $\hat{A}$) u traženom ukupnom ansamblu. Prema tome, pri neselektivnom merenju $\mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid$ prelazi u

$$\sum_n{}' \langle \psi_k \mid \hat{P}_n \mid \psi_k \rangle \frac{\hat{P}_n \mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid \hat{P}_n}{\langle \psi_k \mid \hat{P}_n \mid \psi_k \rangle} = \sum_n \hat{P}_n \mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid \hat{P}_n. \tag{4.3.30}$$

Prvi zbir je samo po n za koje je $\langle \psi_k \mid \hat{P}_n \mid \psi_k \rangle > 0$, drugi je po svim n, jer ako je ovaj broj nula, dotični sabirak u poslednjem izrazu u (4.3.30) se svodi automatski na nulu.

Da bismo zaključili u šta prelazi polazno mešano stanje $\hat{\rho} = \sum_k w_k \mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid$, treba samo da sakupimo podansamble (4.3.30) u nadansambl sa statističkim težinama $w_k = \frac{N_k}{N}$:

$$\hat{\rho} \to \sum_k w_k \sum_n \hat{P}_n \mid \psi_k \rangle\langle \psi_k \mid \hat{P}_n = \sum_n \hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\rho}'. \tag{4.3.31}$$

Pošto smo izveli (4.3.20), analizirajmo $\hat{\rho}'$. Usled $\langle \varphi \mid \hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n \mid \varphi \rangle = (\langle \varphi \mid \hat{P}_n) \hat{\rho} (\hat{P}_n \mid \varphi \rangle)$, $\forall \mid \varphi \rangle \in \mathcal{H}$, pozitivnost operatora $\hat{\rho}$ povlači isto i za $\hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n$. Dalje, $\mathrm{Tr}\,(\hat{P}_n \hat{\rho}) \hat{P}_n = \mathrm{Tr}\,\hat{P}_n (\hat{P}_n \hat{\rho}) = \mathrm{Tr}\,(\hat{P}_n \hat{\rho}) = v(a_n, \hat{A}, \hat{\rho}) < \infty$. Ograničimo se opet na n, za koje je $v(a_n, \hat{A}, \hat{\rho}) > 0$ i definišimo

$$\hat{\rho}'_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n}{\mathrm{Tr}\,(\hat{P}_n \hat{\rho})}. \tag{4.3.32}$$

Očigledno, iz jednakosti u (4.3.31) sad sledi

$$\hat{\rho}' = \sum_n{}' \mathrm{Tr}\,(\hat{P}_n \hat{\rho}) \frac{\hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n}{\mathrm{Tr}\,(\hat{P}_n \hat{\rho})} = \sum_n{}' v(a_n, \hat{A}, \hat{\rho}) \hat{\rho}'_n. \tag{4.3.33}$$

Uverimo se, najzad, da $\hat{\rho}'_n$ ima oštru vrednost a_n od $\hat{A}$: $v(a_n, \hat{A}, \hat{\rho}'_n) = \mathrm{Tr}\,(\hat{P}_n \frac{\hat{P}_n\hat{\rho}\hat{P}_n}{\mathrm{Tr}\,(\hat{P}_n\hat{\rho})}) = 1,\ \forall n$. Prema tome, (4.3.33) upravo daje razlaganje $\hat{\rho}'$ u podansamble koji su dali pojedine rezultate a_n u merenju $\hat{A}$, tj. razlaganje na tražene podansamble selektivnih merenja. Drugim rečima, $\hat{\rho}'_n$ iz (4.3.32) je mešano stanje koje nastaje nakon selektivnog merenja a_n od $\hat{A}$ u stanju $\hat{\rho}$. Time je i teorem dokazan.

4.4 Kvantni podsistemi i mešavine druge vrste

U ovom odeljku proučavaćemo kako da se kvantno-mehanički opisuje podsistem kompozitnog sistema koji je u čistom stanju. Ispostaviće se da u opštem slučaju podsistem nije u čistom već u mešanom stanju (tzv. mešavina druge vrste). Izvešćemo tzv. redukovane statističke operatore, koji opisuju mešavine druge vrste i izrazićemo kvantne korelacije između dva podsistema u vidu tzv. Schmidt-ove kanonične forme vektora stanja kompozitnog sistema. Ukazaćemo na intuitivni paradoks u kvantnim korelacijama udaljenih čestica (tzv. distantne korelacije).

Kao ilustraciju, daćemo kratak opis jednog eksperimenta sa distantnim polarizacionim korelacijama dva fotona; objasnićemo ukratko distantne korelacije u eksperimentu sa semireflektivnim ogledalom iz prve glave; i, najzad, dopunićemo našu diskusiju o nestabilnim pobuđenim stanjima kvantnih sistema (kraj glave 3) sa gledišta distantnih korelacija.

4.4.1 Mešavine druge vrste

Pretpostavimo da imamo *dvočestični* kvantni sistem. Čestice ćemo numerisati indeksima 1, odnosno 2.

Neka je prva čestica u čistom stanju $\mid \psi_1 \rangle$, a druga u čistom stanju $\mid \psi_2 \rangle \in \mathcal{H}_2$. Samim tim dvočestični sistem je u čistom stanju $\mid \psi_1 \rangle \otimes \mid \psi_2 \rangle \in \mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Kao što znamo, ovakvi, tzv. nekorelisani vektori, obrazuju kompozitni prostor $\mathcal{H}_{12}$. To će reći, ako nekorelisanim vektorima pripojimo sve njihove linearne kombinacije (i sve limese linearnih kombinacija, ako je $\mathcal{H}_{12}$ beskonačno-dimenzionalan — inače su automatski uključeni), onda dobijamo ceo prostor $\mathcal{H}_{12}$.

Dakle, nekorelisani vektori ne iscrpljuju $\mathcal{H}_{12}$, tj. čine samo njegov pravi podskup. Ostali vektori u $\mathcal{H}_{12}$ su tzv. *korelisani vektori*. Znači, to su po definiciji vektori $\mid \psi_{12} \rangle \in \mathcal{H}_{12}$, koji ne mogu da se pišu u vidu $\mid \psi_1 \rangle \otimes \mid \psi_2 \rangle$. Ako je kompozitno stanje $\mid \psi_{12} \rangle$ korelisano, onda obe čestice nisu u čistom stanju.

Pitamo se da nisu korelisani vektori možda samo patološki detalj formalizma bez specijalnog fizičkog značenja. Raspravićemo to na primeru.

Ako čestice ne interaguju, na primer ako posmatramo dva elektrona u omotaču atoma helijuma i zanemarimo njihovu interakciju, onda hamiltonijan glasi $\hat{H}_{12} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2m_1}\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}_1) + \frac{1}{2m_2}\hat{\mathbf{p}}_2^2 + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}_2) = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ i potpunu klasifikaciju stanja možemo izvršiti pomoću samih nekorelisanih vektora (uporediti § 3.4.6; mi sad zanemarujemo Pauli-jev princip). U realnosti, međutim, elektroni interaguju, tj. hamiltonijan je vida $\hat{H}_{12} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2m_1}\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \frac{1}{2m_2}\hat{\mathbf{p}}_2^2 + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}_1) + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}_2) + V(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$, gde je poslednji sabirak operator interakcije. Svojstveni vektori ovakvog dvočestičnog operatora su po pravilu korelisani. Znači korelisani vektori su pre pravilo u kvantnoj fizici negoli izuzetak.

Neka je dvočestični sistem u korelisanom čistom stanju $|\,\psi_{12}\,\rangle$. Videli smo da onda ne mogu obe čestice da budu u čistom stanju. Stanja u kojima se nalaze nazivaju se u novije vreme *mešavine druge vrste*[4.4.1]. U kontekstu podsistemskih razmatranja treba zapaziti da je na primer prva čestica podsistem dvočestičnog sistema. Mešano stanje iz prethodnog odeljka naziva se mešavina prve vrste[4.4.2].

Sa mešavinama prve vrste upoznali smo se u prethodnom odeljku. Ovaj odeljak je posvećen proučavanju mešavina druge vrste. U sledećem paragrafu proanaliziraćemo podsistemska merenja i kroz to ćemo doći do preciznije ideje o mešavini druge vrste.

4.4.2 Verovatnoće pri merenju na prvoj čestici

Neka je $|\,\psi_{12}\,\rangle \in \mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ korelisani vektor stanja našeg dvočestičnog sistema. Uporedo sa apstraktnim prostorom stanja $\mathcal{H}_{12}$ koristićemo se i prostorom stanja koordinatne reprezentacije $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbf{r}_2)$.

Ograničićemo diskusiju na *podsistemske* opservable i merenja, tj. radiće se, na primer, isključivo o opservablama koje se odnose samo na prvu česticu, tj. koje kao operatori deluju u $\mathcal{H}_1$. Takva opservabla, ako još ima i čisto diskretan spektar, imaće u $\mathcal{H}_{12}$ spektralni vid

$$\hat{A}_1 \otimes \hat{I}_2 = (\sum_n a_n \hat{P}_1^{(n)}) \otimes \hat{I}_2 = \sum_n a_n (\hat{P}_1^{(n)} \otimes \hat{I}_2). \tag{4.4.1a}$$

U koordinatnoj reprezentaciji (4.4.1a) pojavljuju se kerneli integralnih operatora:

$$\langle \mathbf{r}_1 \mid \hat{A} \mid \mathbf{r}_1' \,\rangle \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2') = \sum_n a_n \langle \mathbf{r}_1 \mid \hat{P}_1^{(n)} \mid \mathbf{r}_1' \,\rangle \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2'). \tag{4.4.1b}$$

Izračunajmo $v(a_n, \hat{A}_1, \psi_{12})$ u koordinatnoj reprezentaciji. $v(a_n, \hat{A}_1, \psi_{12}) = \langle \psi_{12} \mid \hat{P}_1^{(n)} \mid \psi_{12}\,\rangle = \int\int\int\int \mathrm{d}\mathbf{r}_1\, \mathrm{d}\mathbf{r}_2\, \mathrm{d}\mathbf{r}_1'\, \mathrm{d}\mathbf{r}_2' \psi_{12}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \langle \mathbf{r}_1 \mid \hat{P}_1^{(n)} \mid \mathbf{r}_1'\,\rangle \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2') \psi_{12}(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2')$, iz čega sledi

$$v(a_n, \hat{A}_1, \psi_{12}) = \int\int\int \mathrm{d}\mathbf{r}_1\, \mathrm{d}\mathbf{r}_2\, \mathrm{d}\mathbf{r}_1' \psi_{12}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \langle \mathbf{r}_1 \mid \hat{P}_1^{(n)} \mid \mathbf{r}_1'\,\rangle \psi_{12}(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2). \tag{4.4.2}$$

Pošto je svejedno kojim se redom vrše integracije, možemo prvo definisati

$$\langle \mathbf{r}_1' \mid \hat{\rho}_1 \mid \mathbf{r}_1\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int \mathrm{d}\mathbf{r}_2 \psi_{12}(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2) \psi_{12}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \tag{4.4.3}$$

tako da se (4.4.2) onda prepisuje u vidu $v(a_n, \hat{A}_1, \psi_{12}) = \int\int \mathrm{d}\mathbf{r}_1'\, \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \langle \mathbf{r}_1 \mid \hat{P}_1^{(n)} \mid \mathbf{r}_1'\,\rangle \langle \mathbf{r}_1' \mid \hat{\rho} \mid \mathbf{r}_1\,\rangle$, ili u apstraktnom prostoru $\mathcal{H}_1$:

$$\boxed{v(a_n, \hat{A}_1, \psi_{12}) = \mathrm{Tr}_1\,(\hat{P}_1^{(n)} \hat{\rho}_1)}, \tag{4.4.4}$$

[4.4.1] L. D. Landau je još 1927. godine ukazao na postojanje mešavina druge vrste, doduše on ih nije tako zvao (*Zeitschrift für Physik*, **45** (1927) 430).

[4.4.2] I na engleskom jeziku pravi se razlika između "mešavina" prve i druge vrste (*mixture* — čitati: miksče — *of the first kind and of the second kind*) — ovaj termin se koristi kada je reč o podsistemima — i "mešanih stanja" (*mixed states*), koja se pominju u kvantnoj statističkoj fizici. Što se tiče pomenutih "mešavina", govori se takođe o svojstvenoj i nesvojstvenoj mešavini (*proper and improper mixture*).

gde indeks 1 na tragu znači da se trag uzima u $\mathcal{H}_1$.

Šta smo do sad uradili? Iz ψ_{12} konstruisali smo (u koordinatnoj reprezentaciji) jedan operator $\hat{\rho}_1$ u $\mathcal{H}_1$ tako da se iz njega izračunava verovatnoća proizvoljnog merenja na prvoj čestici i to po formuli koja je istog oblika kao (4.3.8) u kvantnoj statističkoj fizici.

Moramo se zapitati da li to ima dubljeg značenja, tj. da li je $\hat{\rho}_1$ onaj objekat u formalizmu koji izražava mešavinu druge vrste. Odgovor na ovo pitanje može biti potvrdan samo ako su potvrdni i odgovori na sledeća osnovnija pitanja:

1) Da li je $\hat{\rho}_1$ u $\mathcal{H}_1$ statistički operator? (Onda opisuje mešano stanje.)

2) Da li se formuli (4.4.3) može dati invarijantan smisao, tj. smisao nezavisan od koordinatne reprezentacije? (Inače je fizički smisao formule (4.4.3) pod sumnjom, jer je izbor reprezentacije bio slučajan.)

3) Da li se i očekivana vrednost mora izraziti formulom koja je istog oblika kao formula (4.3.15) u kvantnoj statističkoj fizici? (Ovo pitanje je više formalno.)

4.4.3 Redukovani statistički operatori

Najlakše možemo odgovoriti na pitanje 3). Naime, iz rezonovanja u prethodnom paragrafu je jasno da smo $\hat{P}_1^{(n)}$ mogli zameniti opštim projektorom intervala $[a,b]$ (spektralnom merom intervala) $\hat{P}_{[a,b]}(\hat{A}_1)$ sasvim proizvoljne opservable $\hat{A}_1$ u $\mathcal{H}_1$; formula (4.4.4) bi ipak s1edila. Jedan pogled na dokaz pomenute formule (4.3.15) uveriće nas da iz (4.4.4) mora da sledi

$$\boxed{\langle\, \hat{A}_1 \,\rangle = \langle \psi_{12} \mid \hat{A}_1 \mid \psi_{12} \,\rangle = \mathrm{Tr}_1\, \hat{A}_1 \hat{\rho}_1} \tag{4.4.5}$$

(makar opservabla $\hat{A}_1$ imala i kontinualni deo spektra).

Što se tiče pitanja 1), uzmimo proizvoljni $\mid \varphi_1 \rangle \in \mathcal{H}_1$ i ispitajmo pre svega da li je $\hat{\rho}_1$ pozitivan operator: $\langle \varphi_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid \varphi_1 \rangle = \int\int \mathrm{d}\mathbf{r}_1\, \mathrm{d}\mathbf{r}_1' \varphi_1^*(\mathbf{r}_1) \langle \mathbf{r}_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid \mathbf{r}_1' \rangle \varphi_1(\mathbf{r}_1') = \int\int\int \mathrm{d}\mathbf{r}_1\, \mathrm{d}\mathbf{r}_2\, \mathrm{d}\mathbf{r}_1' \varphi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ $\psi_{12}^*(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2) \varphi_1(\mathbf{r}_1')$, stoga

$$\langle \varphi_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid \varphi_1 \,\rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{r}_2 \left| \int \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \varphi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right|^2 \geq 0. \tag{4.4.6}$$

Dakle, $\hat{\rho}_1$ jeste pozitivan operator.

Kao sledeće, izračunajmo trag od $\hat{\rho}_1$.

$$\mathrm{Tr}_1\, \hat{\rho}_1 = \int \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \langle \mathbf{r}_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid \mathbf{r}_1 \,\rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \int \mathrm{d}\mathbf{r}_2 \psi_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{12}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle\, \psi_{12} \mid \psi_{12} \rangle = 1 \tag{4.4.7}$$

Dakle, $\hat{\rho}_1$ jeste statistički operator.

Da bismo, najzad, dobili odgovor i na pitanje 2), treba da uvedemo proizvoljan bazis $\{\mid n \rangle | \forall n\}$ u $\mathcal{H}_1$ i da izračunamo matrični element $\langle n' \mid \hat{\rho}_1 \mid n \,\rangle$ i to u koordinatnoj reprezentaciji. Dobija se

$$\langle n' \mid \hat{\rho}_1 \mid n \,\rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{r}_2 \langle n' \mid \langle\, \mathbf{r}_2 \mid \psi_{12} \rangle \langle\, \psi_{12} \mid n \rangle \mid \mathbf{r}_2 \,\rangle. \tag{4.4.8a}$$

Zadatak 4.4.1 Dokazati (4.4.8a).

Radi upoređenja sa (4.4.8a) ispisaćemo formulu (4.4.3) eksplicitno:

$$\langle \mathbf{r}_1' \mid \hat{\rho}_1 \mid \mathbf{r}_1 \rangle = \int d\mathbf{r}_2 \langle \mathbf{r}_1' \mid \langle\, \mathbf{r}_2 \mid \psi_{12}\rangle\langle\, \psi_{12} \mid \mathbf{r}_1\rangle \mid \mathbf{r}_2 \rangle. \tag{4.4.9}$$

Vidimo da je analogija kompletna.

Lako se vidi da se kontinualni bazis $\{\mid \mathbf{r}_2 \rangle \mid \forall \mathbf{r}_2\} \subset \mathcal{U}(\mathcal{H}_2)$, po kome se integriše u (4.4.8a), može zameniti diskretnim bazisom, recimo $\{\mid k \rangle \mid \forall k\} \subset \mathcal{U}(\mathcal{H}_2)$, tako da (4.4.8$a$) postaje

$$\langle n' \mid \hat{\rho}_1 \mid n \rangle = \sum_k \langle n' \mid \langle\, k \mid \psi_{12}\rangle\langle\, \psi_{12} \mid n\rangle \mid k \rangle. \tag{4.4.8b}$$

Zadatak 4.4.2 Pokazati kako iz (4.4.8a) sledi (4.4.8b).

Dakle, i na pitanje (2) dobili smo potvrdan odgovor: operator $\hat{\rho}_1$ jeste entitet čije je fizičko intepretiranje sasvim solidno zasnovano.

Uobičajeno je da se piše operatorska (invarijantna) formula

$$\boxed{\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_2\ \mid \psi_{12}\rangle\langle\psi_{12} \mid}, \tag{4.4.10}$$

gde je Tr_2 tzv. parcijalni trag, tj. trag samo po nekom bazisu $\mathcal{H}_2$. Formula (4.4.10) (kao i svaka formula sa tragom) je u stvari simbolična. Izračunavanje se mora izvršiti u nekom bazisu, ali izbor bazisa pri tome nema uticaja na operator $\hat{\rho}_1$.

Formule (4.4.3) i (4.4.8b) se obično pišu nešto praktičnije stavljajući umesto $\langle \mathbf{r}_1 \mid \langle \mathbf{r}_2 \mid$ simbol $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \mid$ itd.

$$\langle \mathbf{r}_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid \mathbf{r}_1' \rangle = \int d\mathbf{r}_2 \langle\, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \mid \psi_{12}\rangle\langle\, \psi_{12} \mid \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2\rangle. \tag{4.4.11}$$

$$\langle n \mid \hat{\rho}_1 \mid n' \rangle = \sum_k \langle\, n, k \mid \psi_{12}\rangle\langle\, \psi_{12} \mid n', k\rangle. \tag{4.4.12}$$

To su dve konkretne realizacije[4.4.3] simbolične definicije (4.4.10).

Naravno, moguća je i mešovita realizacija sa diskretnim i kontinualnim bazisom kao (4.4.8a) itd.

Statistički operator $\hat{\rho}_1$ naziva se *redukovani statistički operator* ili *redukovana matrica gustine* prve čestce u stanju $\mid \psi_{12} \rangle$ dvočestičnog kvantnog sistema, a sam algoritam uzimanja parcijalnog traga u formuli (4.4.10) naziva se *redukcija* statističkog operatora $\mid \psi_{12} \rangle\langle\psi_{12} \mid$ kompozitnog sistema.

Pošto nam formule (4.4.4) i (4.4.5) kazuju da iz $\hat{\rho}_1$ sledi kvantno-mehaničko opisivanje svih merenja, koja se odnose samo na prvu česticu, $\hat{\rho}_1$ u kvantno-mehaničkom formalizmu *predstavlja mešavinu druge vrste.*

Celokupno izloženo rezonovanje važi i za nekorelisano stanje $\mid \phi_{12} \rangle = \mid \psi_1 \rangle \mid \varphi_2 \rangle$, samo onda

$$\hat{\rho}_1 = \mid \psi_1 \rangle\langle\psi_1 \mid. \tag{4.4.13}$$

[4.4.3] Može da se postavi pitanje da li $\hat{\rho}_1$ uopšte postoji, tj. da li je na primer $\langle n \mid \hat{\rho}_1 \mid n' \rangle$ iz (4.4.12) konačan kompleksni broj. Potvrdan odgovor odmah sledi iz jednakosti $\langle \psi \mid \hat{\rho}_1 \mid \varphi \rangle = \langle \psi_{12} \mid \{(\mid \varphi\rangle\langle\psi \mid)_1 \otimes \hat{I}_2\} \mid \psi_{12}\rangle\ \forall \mid \psi\rangle, \mid \varphi\rangle \in \mathcal{H}_1$, u čije važenje se čitalac može uveriti ispisivanjem leve i desne strane u proizvoljnim bazisima.

Zadatak 4.4.3 Dokazati (4.4.13).

Pošto je $\hat{\rho}_1$ statistički operator, prva čestica je u slučaju korelisanog $|\,\psi_{12}\rangle$ u stvari u *mešanom stanju*, ali to mešano stanje ima sasvim drugačiji fizički smisao, nego u kvantnoj statističkoj fizici. Nepotpuno poznavanje podsistema (tj. prve čestice) u ovom slučaju nije subjektivni moment (nedovoljno precizno filtriran ansambl), nego objektivna posledica *korelisanosti* kompozitnog čistog stanja $|\,\psi_{12}\,\rangle$.

Drugi podsistem, tj. druga čestica, igra u formalizmu potpuno simetričnu ulogu kao prvi. Samo ćemo nabrojati dotične relacije analogne dokazanim.

$$\hat{\rho}_2 = \mathrm{Tr}_1\ |\,\psi_{12}\,\rangle\langle\psi_{12}\,|, \tag{4.4.14}$$

$$v(a_n, \hat{A}_2, \psi_{12}) = \mathrm{Tr}_2(\hat{P}_2^{(n)}\hat{\rho}_2), \quad \hat{I}_1 \otimes \hat{A}_2 = \sum_n a_n(\hat{I}_1 \otimes \hat{P}_2^{(n)}), \tag{4.4.15a,b}$$

$$\langle\ \hat{A}_2\ \rangle = \langle\psi_{12}\,|\,\hat{A}_2\,|\,\psi_{12}\,\rangle = \mathrm{Tr}_2\hat{A}_2\hat{\rho}_2, \tag{4.4.16}$$

a (4.4.14) znači

$$\langle k\,|\,\hat{\rho}_2\,|\,k'\,\rangle = \sum_k \langle\ n, k\,|\,\psi_{12}\rangle\langle\ \psi_{12}\,|\,n, k'\rangle \tag{4.4.17}$$

(imamo u vidu bazise kao gore), itd. Nekorelisano stanje $|\ \phi_{12}\ \rangle = |\ \psi_1\ \rangle\ |\ \varphi_2\ \rangle$ implicira $\hat{\rho}_2 = |\,\varphi_2\,\rangle\langle\varphi_2\,|$.

Kada je kompozitni, tj. dvočestični, sistem u mešanom stanju $\hat{\rho}_{12}$ (statistički operator u $\mathcal{H}_{12}$), redukovani statistički operatori se dobijaju formulama

$$\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_2\hat{\rho}_{12}, \quad \hat{\rho}_2 = \mathrm{Tr}_1\,\hat{\rho}_{12}, \tag{4.4.18a,b}$$

koje su direktna uopštenja od (4.4.10), odnosno (4.4.14).

Zadatak 4.4.4 Dokazati (4.4.18).

Prema tome, pojam mešavine druge vrste, za čije opisivanje služi redukovani statistički operator, relevantan je podjednako za mešano (u užem smislu) kao i za čisto stanje kompozitnog sistema.

Sve rečeno u ovom odeljku, naravno, važi za bilo koji kompozitni sistem od dva podsistema; dvočestični sistem nam služi samo kao najprostiji konkretan primer.

4.4.4 * Kvantne korelacije podsistema i Schmidt-ova kanonična forma

U ovom paragrafu započećemo proučavanje kvantnih korelacija podsistema tako što ćemo formulisati teorem o kanoničnoj (tj. najprostijoj) formi dvočestičnog vektora stanja.(Dokaz ćemo dati u Dodatku § 4.4.9.) Ova forma se naziva *Schmidt-ova kanonična forma* ili *biortogonalni razvoj* pomenutog kompozitnog vektora stanja.

Teorem 4.4.1 *Neka je* $\mid \psi_{12} \rangle \in \mathcal{H}_{12}$ *proizvoljan vektor stanja dvočestičnog kvantnog sistema. Neka su* $\hat{\rho}_1$ *i* $\hat{\rho}_2$ *redukovani statistički operatori prve odnosno druge čestice u stanju* $\mid \psi_{12} \rangle$ *i neka je*

$$\hat{\rho}_1 = \sum_n r_n \mid \chi_1^{(n)} \rangle\langle \chi_1^{(n)} \mid, \; r_n > 0, \forall n \tag{4.4.19}$$

spektralna forma[4.4.4,4.4.5] *od* $\hat{\rho}_1$. *Onda se* $\mid \psi_{12} \rangle$ *može napisati u sledećem vidu:*

$$\boxed{\mid \psi_{12} \rangle = \sum_n \sqrt{r_n} \mid \chi_1^{(n)} \rangle \otimes \mid \chi_2^{(n)} \rangle}, \tag{4.4.20}$$

gde su $\mid \chi_2^{(n)} \rangle$ *ortonormirani svojstveni vektori od* $\hat{\rho}_2$, *koji odgovaraju svojstvenim vrednostima* r_n *(istim kao u (4.4.19)); drugim rečima,* $\hat{\rho}_2$ *ima spektralnu formu (uz primedbu 4.4.4):*

$$\hat{\rho}_2 = \sum_n r_n \mid \chi_2^{(n)} \rangle\langle \chi_2^{(n)} \mid . \tag{4.4.21}$$

Naravno, u (4.4.20) i (4.4.21) se sumira po istom indeksu kao u (4.4.19). Važno je zapaziti da $\hat{\rho}_1$ i $\hat{\rho}_2$ imaju nužno iste pozitivne svojstvene vrednosti sa jednakim multiplicitetima. Drugim rečima, imamo spektralnu "jednakost" redukovanih statističkih operatora, bar što se tiče njihovih oblasti likova.

Iz Teorema T 4.4.1 odmah sledi da je ovo ne samo potreban nego i dovoljan uslov za odnos između $\mid \psi_{12} \rangle$ i $\hat{\rho}_1$, $\hat{\rho}_2$:

Korolar 4.4.1 *Proizvoljan statistički operator* $\hat{\rho}_1$ *u* $\mathcal{H}_1$ *i ma koji statistički operator* $\hat{\rho}_2$ *u* $\mathcal{H}_2$, *ali takav da ima iste svojstvene vrednosti kao* $\hat{\rho}_1$, *i to sa istim multiplicitetima, definišu jedan vektor* $\mid \psi_{12} \rangle \in \mathcal{H}_{12}$ *preko desne strane od (4.4.20) (uz pomoć (4.4.19) i (4.4.21)), tako da su pomenuti* $\hat{\rho}_1$ *i* $\hat{\rho}_2$ *njegovi redukovani statistički operatori.*

Dokaz: Odmah sledi polazeći od (4.4.19) i (4.4.21) i uzimajući desnu stranu od (4.4.20) kao definiciju leve strane. *Q. E. D.*

Zadatak 4.4.5 Neka je zadat $\mid \psi_{12} \rangle$ pomoću (4.4.20) tako da znamo da su vektori $\mid \chi_1^{(n)} \rangle$ ortogonalni, vektori $\mid \chi_2^{(n)} \rangle$ takođe ortogonalni i svi $\sqrt{r_n}$ pozitivni. Pokazati da je onda $\mid \psi_{12} \rangle$ u Schmidt-ovoj kanoničnoj formi, te da važe i spektralne formule (4.4.19) i (4.4.21).

Nekorelisan vektor je očigledno specijalni slučaj u kojem u (4.4.20) (kao i u (4.4.19) i (4.4.21)) postoji samo jedan sabirak. Očigledno, ako je $\mid \psi_{12} \rangle$ korelisan vektor, onda i $\hat{\rho}_1$ i $\hat{\rho}_2$ opisuju nehomogeno stanje.

[4.4.4] Kada se piše spektralna forma pomoću svojstvenih vektora kao u (4.4.19), a ne pomoću svojstvenih projektora kao na primer $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$, $n \neq n' \Rightarrow a_n \neq a'_n$, onda može biti ponavljanja svojstvenih vrednosti (recimo $n \neq n'$, a ipak $r_n = r'_n$) i u takvom slučaju izbor svojstvenih pravaca nije jednoznačan. U smislu ove slobode (unutar potprostora), izbor svojstvenih vektora $\{\mid \chi_1^{(n)} \rangle | \forall n\}$ je proizvoljan, a izbor svojstvenih vektora $\mid \chi_2^{(n)} \rangle$ u (4.4.20) i (4.4.21) je jednoznačno određen (kao što ćemo videti niže u (4.4.26)) izborom svojstvenog podbazisa $\{\mid \chi_1^{(n)} \rangle | \forall n\}$ i samim vektorom $\mid \psi_{12} \rangle$.

[4.4.5] Što se tiče podbazisa $\{\mid \chi_1^{(n)} \rangle | \forall n\} \subset \mathcal{H}_1$, on obrazuje oblast likova od $\hat{\rho}_1$ (uporediti Napomenu N 4.4.2). Drugim rečima, od kompletnog svojstvenog bazisa za $\hat{\rho}_1$ izostavljamo podbazis koji obrazuje svojstveni potprostor od $\hat{\rho}_1$, koji odgovara svojstvenoj vrednosti nula. Potpuno analogno stoje stvari sa $\{\mid \chi_2^{(n)} \rangle | \forall n\} \subset \mathcal{H}_2$, i $\hat{\rho}_2$ u $\mathcal{H}_2$.

Pretpostavimo da je $\hat{A}_1$ opservabla definisana za prvu česticu i to takva da je, kao što se kaže, *kompatibilna* sa $\hat{\rho}_1$ tj. da je $[\ \hat{A}_1, \hat{\rho}_1\ ] = 0$, i da je kompletna opservabla (uporediti § 2.4.2). Osim toga, neka je $\{\mid \chi_1^{(n)}\ \rangle | \forall n\}$ zajednički svojstveni podbazis $\hat{\rho}_1$ i $\hat{A}_1$ (uporediti stav S 2.4.6), koji se pojavljuje u (4.4.19). Onda, zbog kompletnosti opservable A_1, svaki $\mid \chi_1^{(n)}\ \rangle$ je određen jednoznačno (do otvorenog faznog faktora) odgovarajućom svojstvenom vrednošću a_n od A_1. Pitamo se kako će se promeniti $\mid\ \psi_{12}\ \rangle$ ako se na dvočestičnom sistemu u tom stanju izvrši selektivno prediktivno merenje svojstvene vrednosti a_n podsistemske opservable A_1.

Korolar 4.4.2 *Usled pomenutog merenja,* $\mid \psi_{12}\,\rangle$ *će preći u nekorelisano stanje*

$$\mid \chi_1^{(n_0)}\ \rangle \otimes \mid \chi_2^{(n_0)}\ \rangle, \tag{4.4.22}$$

ako je $v(a_n, \hat{A}_1, \psi_{12}) > 0$.

Dokaz: Iz teorema T 2.4.4 sledi da na (4.4.20) moramo primeniti projektor $\mid\ \chi_1^{(n_0)}\ \rangle\langle\ \chi_1^{(n_0)}\ \mid \otimes \hat{I}_2$ i posle toga normirati dobijeni vektor. Projektovanje daje $\sum_n r_n \mid\ \chi_1^{(n_0)}\ \rangle\langle\ \chi_1^{(n_0)}\ \mid \chi_1^{(n)}\rangle \otimes (\hat{I}_2 \mid \chi_2^{(n_0)}\ \rangle)$, što se zbog ortonormiranosti vektora $\mid \chi_1^{(n)}\ \rangle$ nakon normiranja svodi na (4.4.22).
Može se pokazati (videti referencu u primedbi 4.4.6) da stanje druge čestice postaje $\mid\ \chi_2^{(n_0)}\ \rangle$ i kada se na prvoj čestici vrši *retrospektivno* selektivno merenje vrednosti a_n opservable $\hat{A}_1$. *Q. E. D.*

***Napomena* 4.4.1** *Fizički smisao Korolara K 4.4.2 glasi: ako se na prvoj čestici meri opservabla* $\hat{A}_1$ *kompatibilna sa stanjem prve čestice* $\hat{\rho}_1$ *i ako se dobije rezultat* a_{n_0}*, onda se samim tim druga čestica prevodi u stanje* $\mid\ \chi_2^{(n_0)}\ \rangle$.

Intuitivni paradoks sadržan u ovom iskazu postaje dramatičan kada pretpostavimo da korelisani vektor $\mid \psi_{12}\,\rangle$ opisuje dve čestice, koje su *udaljene* jedna od druge, te usled udaljenosti ne interaguju. Kvantne korelacije inherentne u $\mid \psi_{12}\,\rangle$ se onda nazivaju *distantnim korelacijama*. Pri podsistemskom merenju na prvoj čestici onda niti merni aparat, niti prva čestica ne interaguju sa drugom česticom, a ova ipak drastično menja svoje stanje[4.4.6] iz $\hat{\rho}_2$ u $\mid \chi_2^{(n_0)}\,\rangle$.

Nameće se zaključak da suština kvantnih korelacija, u specijalnom slučaju distantnih korelacija, koje sadrži dato stanje $\mid\ \psi_{12}\,\rangle$, leži upravo u tome koje stanje $\mid\ \chi_2^{(n_0)}\ \rangle$ odgovara datom svojstvenom stanju $\mid \chi_1^{(n_0)}\,\rangle$. Stoga ćemo u sledećem paragrafu proučiti kako je $\mid \chi_2^{(n_0)}\ \rangle$ određen.

4.4.5 * Parcijalni skalarni proizvod

Naučimo najpre jednu novu operaciju, koja je za vektore analogon parcijalnog traga (definisanog za statističke operatore).

Neka je $\varphi(\mathbf{r}_1)$ proizvoljni element u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1)$, a $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ proizvoljni element u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Definišimo

$$\chi_2(\mathbf{r}_2) \stackrel{\text{def}}{=} \int \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \varphi_1^*(\mathbf{r}_1)\phi_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \tag{4.4.23}$$

Čitalac se lako može uveriti da je $\chi_2(\mathbf{r}_2)$ po kvadratu modula konačno integrabilna funkcija, tj. da je element u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_2)$. Šta više, lako je videti (analogno kao pri analizi pitanja 2) u paragrafu

[4.4.6] Ovo tzv. distantno merenje druge čestice je detaljno proučeno u sledećem radu (u kome se koristila i tehnika antilinearnih operatora radi izučavanja distantnih korelacija): F. Herbut, M. Vujičić, *Annals of Physics*, **96** (1976) 382.

§ 4.4.3) da je (4.4.23) samo realizacija u koordinatnoj reprezentaciji apstraktne ili invarijantne operacije

$$| \chi_2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi_1 \mid \phi_{12} \rangle\rangle, \qquad (4.4.24)$$

gde su $| \chi_1 \rangle \in \mathcal{H}_1$ i $| \phi_{12} \rangle \in \mathcal{H}_{12}$ proizvoljni vektori, a $| \chi_2 \rangle \in \mathcal{H}_2$. (Pišemo $| \phi_{12} \rangle\rangle$ na desnoj strani od (4.4.24) da bismo podsetili da se skalarni proizvod vrši samo u jednom faktor prostoru, a to pokazuje i ponavljanje indeksa 1.) Operacija (4.4.23) ili (4.4.24) naziva se *parcijalni skalarni proizvod*.

Zadatak 4.4.6 Pokazati da je talasna funkcija $\chi_2(\mathbf{r}_2)$, definisana sa (4.4.23) po kvadratu modula konačno integrabilna.

Zadatak 4.4.7 Pokazati da se sa (4.4.23) može preći na

$$\langle n_2 \mid \chi_2 \rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \langle \varphi_1 \mid \mathbf{r}_1 \rangle \langle \mathbf{r}_1 \mid \langle n_2 \mid \phi_{12} \rangle\rangle,$$

što daje smisao simboličnoj formuli (4.4.24).

Sad možemo izračunati do sada nepoznate vektore $| \chi_2^{(n)} \rangle$ u (4.4.20). Naime, za svaki n treba samo da izračunamo parcijalni skalarni proizvod $\langle \chi_1^{(n_0)} \mid \psi_{12} \rangle\rangle$ sa $| \psi_{12} \rangle$ iz (4.4.20). Pošto je ovaj proizvod linearan po drugom faktoru (kao što jedan pogled na (4.4.23) može da nas uveri), dobićemo

$$\langle \chi_1^{(n_0)} \mid \psi_{12} \rangle\rangle = \sum_n \sqrt{r_n} \langle \chi_1^{(n_0)} \mid \chi_1^{(n)} \rangle \mid \chi_2^{(n)} \rangle = \sqrt{r_{n_0}} \mid \chi_2^{(n_0)} \rangle. \qquad (4.4.25)$$

Zadatak 4.4.8 Pokazati da iz $| \phi_{12} \rangle = | \psi_1 \rangle \mid \omega_2 \rangle$ i $| \chi_2 \rangle = \langle \varphi_1 \mid \phi_{12} \rangle\rangle$ Sledi $| \chi_2 \rangle = (\langle \varphi_1 \mid \psi_1 \rangle) \mid \omega_2 \rangle$.

Iz (4.4.25) sledi

$$\boxed{| \chi_2^{(n_0)} \rangle = \frac{1}{\sqrt{r_{n_0}}} \langle \chi_1^{(n_0)} \mid \psi_{12} \rangle\rangle}. \qquad (4.4.26)$$

Sad možemo formulisati *algoritamski rezime* za prevođenje datog vektora $| \psi_{12} \rangle \in \mathcal{H}_{12}$ u Schmidt-ovu kanoničnu formu.

i) Izračunati $\hat{\rho}_1$ na osnovu (4.4.10);

ii) izračunati pozitivne svojstvene vrednosti r_n i odgovarajuće svojstvene vektore $| \chi_1^{(n)} \rangle$ od $\hat{\rho}_1$;

iii) izračunati $| \chi_2^{(n)} \rangle$ za svaki $| \chi_1^{(n)} \rangle$ na osnovu (4.4.26). Kad napišemo desnu stranu od (4.4.20), dobijeni vektor je jednak polaznom vektoru $| \psi_{12} \rangle$, kao što nam garantuje teorem T 4.4.1.

U sledećem paragrafu prodiskutovaćemo jedan važan eksperimentalni primer merenja distantnih korelacija.

4.4.6 * Dvofotonske distantne korelacije

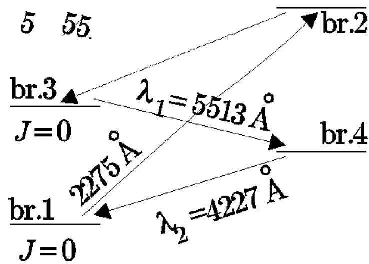
Dva fizičara[4.4.7] sa kalifornijskog univerziteta u Berkeley-u[4.4.8], SAD, izvršili su 1972. godine jedan zanimljiv ekeperiment u vezi sa distantnim korelacijama dvo-fotonskog sistema. Oni su u stvari izvršili minorne (all za njihovu svrhu bitne) izmene u eksperimentu Kocher-a i Commins-a (iz istog istraživačkog centra).

Izložićemo osnovne crte ovog eksperimenta u dva dela:

A) preparacija ansambla dvo-fotonskih sistema u određenom stanju $|\,\psi_{12}\,\rangle$ sa korelisanim jedno-fotonskim stanjima linearne polarizacije;

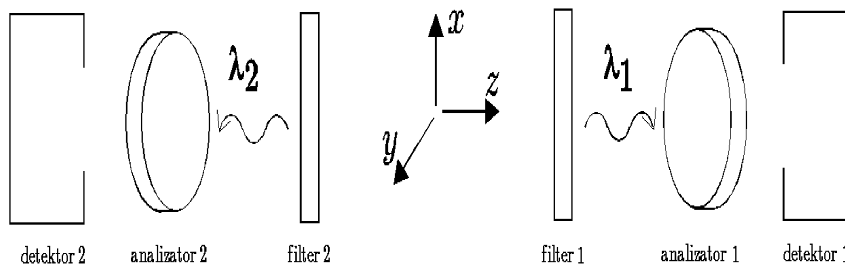
B) koincidentno merenje linearne polarizacije na prvom i drugom fotonu sistema sa rezultatima.

A) Atome kalcijuma u osnovnom stanju ozračivali su monohromatskom svetlošću talasne dužine $\lambda_0 = 2275$Å (Å označava angstrem ili 10^{-8}cm) i dovodili ih u pobuđeno stanje (energetski nivo br. 2 na Crtežu C 4.1). Otprilike 7% ovih pobuđenih atoma deekscitiraju se na pobuđeni nivo br. 3. Sa ovog nivoa nastaje, kao što se kaže, kaskadna deekscitacija u osnovno stanje, tj. izračuju se jedan za drugim dva fotona, prvi talasne dužine $\lambda_1 = 5513$Å, a drugi talasne dužine $\lambda_2 = 4227$Å (videti Crtež C 4.1). Opisana kaskadna emisija dvo-fotonskog sistema dešavala se u koordinatnom početku na Crtežu C 4.2. Monohromatski filter 1 propuštao je samo fotone sa pomenutom talasnom dužinom λ_1, a filter 2 sa λ_2. Tako se prvi foton kretao udesno ka analizatoru (Nicol-ovoj prizmi) 1, koji je propuštao samo fotone linearno polarisane duž x-ose. Iza analizatora foton bi se detektovao, ako prođe kroz analizator u detektoru 1. Drugi foton se kretao ulevo i njega je analogno dočekivao analizator 2 i iza njega detektor 2. U stvari, sav uređaj sa Crteža C 4.2 bez oba analizatora i oba detektora može se smatrati uređajem za preparaciju dvofotonskog sistema.



Slika 4.1: **Kaskadna emisija atoma** Ca.

B) Detektori 1 i 2 radili su u koincidenciji, tj. registrovani su samo događaji kada bi i prvi foton stigao u detektor 1 i drugi foton stigao u detektor 2.



Slika 4.2: **Shema uređaja za koincidentno merenje**.

Vršena je serija eksperimenata sa različitim uglovima ϕ između linije duž koje su bill linearno

[4.4.7] S.J. Freedman and J.F. Clauser, *Physical Review Letters*, **28** (1972) 938.

[4.4.8] Čitati: Berkli.

polarisani fotoni 2, koji su prošli kroz detektor 2 i x-ose; drugim rečima, analizator 2 je bio zarotiran oko z-ose za ugao ϕ u odnosu na analizator 1. Rezultati eksperimenta prikazani su na Crtežu C 4.3. Na apscisi su date vrednosti ugla ϕ, a ordinate predstavljaju $R(\phi)/R_0$, gde je $R(\phi)$ broj koincidenci u jedinici vremena kada su analizatori rotirani za ugao ϕ, a R_0 je broj koincidenci kada su oba analizatora uklonjena; drugim rečima, $R(\phi)/R_0$ je relativna frekvenca posmatranih događaja (uporediti § 1.4.5). Tačkice na dijagramu su eksperimentalni rezultati sa intervalima greške, a neprekidna kriva je izračunata teorijski na osnovu kvantne mehanike. Kao što se vidi, slaganje teorije i eksperimenta je odlično[4.4.9].

Unutrašnje ili polarizaciono stanje dvo-fotonskog sistema bilo je dato u Schmidt-ovoj kanoničnoj formi u vidu

$$\boxed{\mid \psi_{12} \rangle = \sqrt{\tfrac{1}{2}} \mid x_1 \rangle \mid x_2 \rangle + \sqrt{\tfrac{1}{2}} \mid y_1 \rangle \mid y_2 \rangle}, \qquad (4.4.27)$$

gde na primer $\mid x_1 \rangle$ predstavlja stanje prvog fotona u kome je foton polarisan duž x-ose itd. Može se pokazati da je $\mid \psi_{12} \rangle$ iz (4.4.27) teorijska posledica činjenice da i nivo br. 3 i nivo br. 1 (na Crtežu C 4.1) imaju ukupni uglovni moment jednak nuli, kao i nekih detalja opisane preparacije dvo-fotonskog ansambla.

Slika 4.3: **Rezultati Freedman-Clauser-ovog eksperimenta.**

Ako je prvi foton stigao u detektor 1, onda je na njemu (retrospektivno) izmereno stanje $\mid x_1 \rangle$, a onda iz (4.4.27) sledi da je drugi foton preveden u stanje $\mid x_2 \rangle$. Kriva na Crtežu C 4.3 u stvari pokazuje kako verovatnoća prolaska kroz analizator 2 zavisi od ϕ (kada se uzmu u obzir i neke korekcije za realni eksperiment).

Slaganje eksperimenta sa kvantno-mehaničkom predikcijom potvrđuje postojanje distantnih korelacija u prirodi u skladu sa teorijom sa kojom smo se upoznali u prethodnim paragrafima ovog odeljka.

4.4.7 * Distantne korelacije u eksperimentu sa semireflektivnim ogledalom

U paragrafu § 1.2.6 smo se suočili sa jednim paradoksalnim aspektom eksperimenta sa polupropusnim ogledalom i bilo je nagovešteno da je to u nekoj vezi sa distantnim korelacijama. Sada smo u stanju da pristupimo detaljnijoj diskusiji. Razlikovaćemo dva slučaja, (A) i (B).

(A) Pretpostavimo da je početno stanje ogledala pripremljeno tako kao što iziskuje varijanta b'' (iz § 1.2.2) eksperimenta prikazanog na crtežu C 1.3 (uporediti primedbu 1.2.1). To znači da je ogledalo, na primer, *pokretljivo* u odnosu na laboratoriju i da tako omogućuje merenje impulsa od eventualnog odbijanja fotona.

[4.4.9] U stvari, Freedman i Clauser su u opisanom eksperimentu hteli da dobiju odlučujući eksperimantalni odgovor na pitanje da li u prirodi mogu postojati tzv. lokalni skriveni parametri (uporediti kraj od § 2.1.1). Slaganje eksperimenta sa predikcijom kvantne mehanike u stvari pobija hipotezu lokalnih skrivenih parametara, ali u to nećemo podrobnije ulaziti.

Kada foton (f) u tački A interaguje sa ogledalom (O), nastaje jedno kompozitno stanje fotona i ogledala koje ćemo opisati kao $|\,\psi_{f0}\,\rangle$. Iz opisa eksperimenta može se zaključiti da Schmidt-ova kanonična forma ovog vektora glasi

$$\boxed{|\,\psi_{f0}\,\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{2}}\,|\,\chi_f^{(p)}\,\rangle\,|\,\chi_0^{(p)}\,\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{2}}\,|\,\chi_f^{(o)}\,\rangle\,|\,\chi_0^{(o)}\,\rangle}, \tag{4.4.28}$$

gde $|\,\chi_f^{(p)}\,\rangle$ predstavlja stanje "foton je prošao" (p) ka tački D, a $|\,\chi_f^{(o)}\,\rangle$ stanje "foton se odbio" (o) ka tački B; $|\,\chi_0^{(p)}\,\rangle$ i $|\,\chi_0^{(o)}\,\rangle$ su neka odgovarajuća stanja ogledala, karakterisana izostajanjem odnosno prisustvom primljenog impulsa od odbijanja fotona.

Ako ponovo pročitamo § 1.2.6, sad možemo da konstatujemo, pre svega, da se ne može govoriti o tome da je foton u tački A "ili prošao prema optičkim putanjama ili krenuo jednom od njih (što se može manipulisati "kasnije", "sa udaljenog mesta"). Ako se u tački A ne vrši merenje (znači sa izuzetkom varijante b'' iz § 1.2.2), foton je svakako "pošao obema putanjama", kao što se vidi iz (4.4.28). Ali šta to znači?

Nakon interakcije sa ogledalom foton je u mešanom stanju

$$\hat{\rho}_f = \frac{1}{2}\,|\,\chi_f^{(p)}\,\rangle\langle\chi_f^{(p)}\,| + \frac{1}{2}\,|\,\chi_f^{(o)}\,\rangle\langle\chi_f^{(o)}\,|, \tag{4.4.29}$$

kao što (za redukovani statistički operator) sledi iz (4.4.28).

Ako na fotonu onda u tački B ili D vršimo detekciju, onda upravo merimo $|\,\chi_f^{(p)}\,\rangle$ ili $|\,\chi_f^{(o)}\,\rangle$ stanje i jedno od njih konstatujemo (u selektivnom, retrospektivnom merenju). Ali, samim tim vršimo merenje i na ogledalu (distantno merenje), prevodeći ga u stanje $|\,\chi_0^{(p)}\,\rangle$ odnosno u $|\,\chi_0^{(o)}\,\rangle$. Ovo nam se klasičnim rezonovanjem učinilo kao da je foton u tački A "krenuo jednom od optičkih putanja". Dakle, u ovoj varijanti preparacije ogledala, sva paradoksalnost iz § 1.2.6 svodi se na intuitivnu paradoksalnost distantnog merenja.

U prethodnim paragrafima nismo dovoljno naglašavali fantastičnu simetričnost dva podsistema u njihovim kvantnim korelacijama izraženim kroz Schmidt-ovu kanoničnu formu (4.4.20). Pomenuta varijanta b'' iz § 1.2.2 daje ilustraciju te simetričnosti.

Naime, kada na ogledalu vršimo merenje impulsa (od odbijanja fotona), onda u stvari konstatujemo $|\,\chi_0^{(p)}\,\rangle$ ili $|\,\chi_0^{(o)}\,\rangle$ i, opet distantnim merenjem, foton prevodimo u stanje $|\,\chi_f^{(p)}\,\rangle$, odnosno $|\,\chi_f^{(o)}\,\rangle$, tj. primoravamo ga da se ponaša kao da je prošao, odnosno kao da se odbio.

Zapitajmo se kakav će biti difrakcioni obrazac na zastoru C ako u ovoj varijanti preparacije ogledala ne vršimo nikakvo merenje ni na ogledalu ni na fotonu (osim na zastoru C). Odgovor je da nema interferencije, detektovani obrazac je tipa $D_1 + D_2$ (uporediti C 1.2). To sledi iz važne činjenice da, što se tiče podsistemskog merenja, nema razlike između mešavine druge i prve vrste ako su opisani istim statističkim operatorom $\hat{\rho}$ (jer je formula za verovatnoće potpuno ista). Merenje lokalizacije na zastoru C je fotonsko merenje (bez učešća ogledala) i stoga se $\hat{\rho}_f$ iz (4.4.29) ponaša potpuno isto kao mešani ansambl fotona koji bismo dobili mešanjem dva podansambla sa jednakim brojem fotona, jednog u kome svi fotoni idu putem ABC i drugog u kojem svi idu putem ADC.

Dakle, sama priprema ogledala, koja je dovela do stanja $|\,\psi_{f0}\,\rangle$ iz (4.4.28), je isključila interferenciju, a da li faktički merimo "kojim putem je foton išao" ili ne, potpuno je svejedno.

B) Pretpostavimo da je početno stanje ogledala, pripremljeno tako kao što iziskuju varijante a, b i b' eksperimenta. To znači da je ogledalo, na primer, *čvrsto vezano* za laboratoriju. Onda

ono u dobroj približnosti deluje na foton kao spoljašnje polje, tako da je rezultat interakcije nekorelisano kompozitno stanje

$$| \psi_{f0} \rangle = | \psi_f \rangle \otimes | \varphi_0 \rangle. \tag{4.4.30}$$

Čisto stanje fotona može da se piše u vidu

$$| \psi_f \rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} \, | \chi_f^{(p)} \rangle + \sqrt{\frac{1}{2}} \, | \chi_f^{(o)} \rangle, \tag{4.4.31}$$

gde $| \chi_f^{(p)} \rangle$ i $| \chi_f^{(o)} \rangle$ imaju isto značenje kao u prethodnoj varijanti pripreme ogledala, tj. znače prolaženje odnosno odbijanje fotona. Samo, ovog puta se radi o koherentnoj, a ne o nekoherentnoj smeši (u mešavini druge vrste) dveju mogućih optičkih putanja za foton. Usled toga, ako nekim merenjem pre tačke C ne razorimo interferenciju inherentnu u (4.4.31), na zastoru C opažamo interferentni obrazac tipa $D_{1,2}$.

Što se tiče paradoksa iz § 1.2.6, foton u tački A "ide obema putanjama", kao što vidimo iz (4.4.31). Ako "kasnije" i "na udaljenom mestu" vršimo merenje "$| \chi_f^{(p)} \rangle$ ili $| \chi_f^{(o)} \rangle$" onda čisto stanje (4.4.30) pretvaramo (u neselektivnom merenju) u mešano stanje

$$\hat{\rho}'_{f0} = \sqrt{\frac{1}{2}} \, | \chi_f^{(p)} \rangle \langle \chi_f^{(p)} | \otimes | \varphi_0 \rangle \langle \varphi_0 | + \sqrt{\frac{1}{2}} \, | \chi_f^{(o)} \rangle \langle \chi_f^{(o)} | \otimes | \varphi_0 \rangle \langle \varphi_0 | \, . \tag{4.4.32}$$

Zadatak 4.4.9 Pokazati da je mešano stanje fotona u kompozitnom mešanom stanju (4.4.32) isto kao u (4.4.29).

Zadatak 4.4.10 Izračunati iz (4.4.32) u kom je mešanom stanju ogledalo i zaključiti da li pri prelazu iz (4.4.30) u (4.4.32) imamo distantno merenje na ogledalu.

Opet je samo klasični privid da iz činjenice što u pomenutom merenju foton nalazimo u stanju $| \chi_f^{(p)} \rangle$ ili u stanju $| \chi_f^{(o)} \rangle$, sledi da je "foton morao još u tački A da krene jednom od putanja". Baš iz (4.4.30) i (4.4.31) vidimo da nije "morao", nego naprotiv, išao je obema putanjama.

4.4.8 * Distanto merenje pri pobuđivanju kvantnog sistema

U § 3.4.10 smo diskutovali paradoks nestabilnosti pobuđenih stanja i razrešili ga ukazivanjem na činjenicu da se standardne procedure merenja svode na preparaciju kvantnog sistema u određenom svojstvenom stanju (i sa određenim energetskim nivoom) neperturbisanog hamiltonijana, koji, po definiciji, sadrži sve čestične stepene slobode, ali bez elektromagnetnog polja. Pomenuli smo da je i tu posredi distantno merenje. Naoružani formalizmom, sad možemo i ovo pitanje malo preciznije da razmotrimo.

Izdvojmo dva energetska nivoa pomenutog neperturbisanog hamiltonijana $\hat{H}_0$: E_0^0—osnovni nivo i $E_{n_0}^0 (> E_0^0)$—jedan od pobuđenih nivoa. Neka su $| E_0^0 \rangle$ i $| E_{n_0}^0 \rangle$ odgovarajući svojstveni vektori od $\hat{H}_0$ (izostavljamo eventualne dodatne kvantne brojeve). Pretpostavimo da imamo prostorni ansambl kvantnih sistema opisan sa $| E_0 \rangle$ i da ga ozračujemo ansamblom fotona frekvence ν, tako da je

$$E_0^0 + h\nu = E_{n_0}. \tag{4.4.33}$$

Obeležimo sa $\mid 0 \rangle$ stanje elektromagnetnog polja bez ijednog takvog fotona, a sa $\mid h\nu \rangle$ pomenuti ansambl fotona frekvence ν.

U početku, dakle, imamo kompozitno stanje $\mid E_0^0 \rangle \otimes \mid h\nu \rangle$. Usled interakcije elektromagnetnog polja sa sistemom, a pošto nam (4.4.33) obezbeđuje održanje ukupne energije, kompozitni sistem spontanom vremenskom evolucijom prelazi u stanje

$$\boxed{\sqrt{\tfrac{1}{2}} \mid E_0^0 \rangle \otimes \mid h\nu \rangle + \sqrt{\tfrac{1}{2}} \mid E_{n_0}^0 \rangle \otimes \mid 0 \rangle}. \tag{4.4.34}$$

Sad vršimo merenje prisutnosti odnosno odsutnosti fotona frekvence ν, tj. izvesnom tehnikom (na primer preko tamnih linija u spektru) konstatujemo da je dotični foton apsorbovan. To znači da smo (selektivno) izmerili (direktnim merenjem) stanje $\mid 0 \rangle$ elektromagnetnog polja i stanje $\sqrt{\frac{1}{2}} \mid E_{n_0}^0 \rangle \mid 0 \rangle$ kompozitnog sistema. Drugim rečima, pošto je (4.4.34) Schmidt-ova kanonična forma, mi smo distantnim merenjem dobili pobuđeno stanje $\mid E_{n_0}^0 \rangle$ za naš kvantni sistem.

Zadatak 4.4.11 Izvršiti analognu diskusiju za deekscitaciju pobuđenog nivoa.

4.4.9 * Dodatak — izvođenje Schmidt-ove kanonične forme

Neka je $\{\mid m \rangle_1 | \forall m\} \subset \mathcal{H}_1$ kompletan svojstveni bazis redukovanog statističkog operatora $\hat{\rho}_1$ datog kompozitnog vektora stanja $\mid \psi_{12} \rangle$ (uporediti (4.4.10)). Neka je $\{\mid k \rangle_2 | \forall k\}$ proizvoljan bazis u $\mathcal{H}_2$. Napišimo razvoj

$$\mid \psi_{12} \rangle = \sum_m \sum_k \alpha_{mk} \mid m \rangle_1 \mid k \rangle_2. \tag{4.4.35}$$

Pošto je red na desnoj strani od (4.4.35) apsolutno konvergentan, a direktni proizvod je linearan i neprekidan, možemo pregrupisati sabirke u (4.4.35) na sledeći način: $\mid \psi_{12} \rangle = \sum_m \mid m \rangle_1 \otimes (\sum_k \alpha_{mk} \mid k \rangle_2)$, tj.

$$\mid \psi_{12} \rangle = \sum_m \mid m \rangle_1 \otimes \mid \chi_m \rangle_2, \quad \mid \chi_m \rangle_2 = \sum_k \alpha_{mk} \mid k \rangle_2, \ \forall m. \tag{4.4.36a,b}$$

Uzgred, da napomenemo da se (4.4.36a) naziva *razvijanje kompozitnog vektora po parcijalnom bazisu* $\{\mid m \rangle_1 | \forall m\} \subset \mathcal{H}_1$.

Zadatak 4.4.12 Pokazati da razvijanje po parcijalnom bazisu (4.4.36a) ne zavisi od izbora drugog bazisa $\{\mid k \rangle_2 | \forall k\} \subset \mathcal{H}$.

Naš cilj je sad da dokažemo: $m \neq m' \Rightarrow \langle \chi_m \mid \chi_{m'} \rangle = 0$. Pošto je $\langle \chi_m \mid \chi_{m'} \rangle = \sum_k \sum_{k'} \alpha_{mk}^* \alpha_{m'k'} \langle k \mid k' \rangle = \sum_k \alpha_{mk}^* \alpha_{m'k}$ i $\alpha_{mk} = \langle m, k \mid \psi_{12} \rangle$ (iz (4.4.35)), dalje imamo $\langle \chi_m \mid \chi_{m'} \rangle = \sum_k \langle m', k \mid \psi_{12} \rangle \langle \psi_{12} \mid m, k \rangle$. Uzimajući u obzir (4.4.8b), najzad sledi

$$\langle \chi_m \mid \chi_{m'} \rangle = \langle m' \mid \hat{\rho}_1 \mid m \rangle. \tag{4.4.37}$$

Pošto $\hat{\rho}_1$ u reprezentaciji sopstvenog svojstvenog bazisa postaje dijagonalna matrica, iz (4.4.37) sledi $m \neq m' \Rightarrow \langle \chi_m \mid \chi_{m'} \rangle = 0$. Prepišimo (4.4.36$a$) u vidu

$$\mid \psi_{12} \rangle = \sum_n \|\chi_n\| \mid n \rangle_1 \otimes (\frac{1}{\|\chi_n\|}) \mid \chi_n \rangle_2, \tag{4.4.38}$$

gde smo se ograničili na one vrednosti od m za koje $\|\chi_n\| > 0$, a njih pišemo kao n.

Adaptacijom sadašnje notacije na notaciju u Teoremu koji dokazujemo, tj. stavljajući $r_n \stackrel{\text{def}}{=} \|\chi_n\|^2$, $|\,\chi_1^{(n)}\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\,n\,\rangle_1$, $|\,\chi_2^{(n)}\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} (\frac{1}{\|\chi_n\|})\,|\,\chi_n\,\rangle_2$, dobijamo

$$|\,\psi_{12}\,\rangle = \sum_n \sqrt{r_n}\,|\,\chi_1^{(n)}\,\rangle\,|\,\chi_2^{(n)}\,\rangle, \tag{4.4.39}$$

što je identično sa (4.4.20).

Iz (4.4.37) se vidi da je $r_n = \|\chi_n\|^2 = \langle n' \mid \hat{\rho}_1 \mid n\,\rangle$ svojstvena vrednost od $\hat{\rho}_1$, koja odgovara svojstvenom vektoru $|\,n\,\rangle_1$. Ako iz (4.4.39) izračunamo $\hat{\rho}_2$, dolazimo do $\hat{\rho}_2 = \mathrm{Tr}_1\,(\sum_{n,n'}\sqrt{r_n}\sqrt{r_{n'}}\,|\,\chi_1^{(n)}\,\rangle\langle\chi_1^{(n')}\,| \otimes |\,\chi_2^{(n)}\,\rangle\langle\chi_2^{(n')}\,|)$, što usled $n \neq n' \to \mathrm{Tr}_1\,(|\,\chi_1^{(n)}\,\rangle\langle\chi_1^{(n')}\,|) = 0$, $\mathrm{Tr}_1\,(|\,\chi_1^{(n)}\,\rangle\langle\chi_1^{(n)}\,|) = 1$, $\forall n$, daje

$$\hat{\rho}_2 = \sum_n r_n\,|\,\chi_2^{(n)}\,\rangle\langle\chi_2^{(n)}\,|\,. \tag{4.4.40}$$

Činjenicu da (4.4.40) predstavlja spektralnu formu za $\hat{\rho}_2$ možemo videti iz

$$\langle\chi_2^{(n)} \mid \hat{\rho}_2 \mid \chi_2^{(n')}\,\rangle = \delta_{nn'} r_n, \tag{4.4.41}$$

što odmah sledi iz (4.4.40), pošto već znamo da su $|\,\chi_2^{(n)}\,\rangle$ ortogonalni vektori.

***Napomena* 4.4.2** *Iz (4.4.37) je očigledno da je $\|\chi_n\| > 0$ ako i samo ako $\langle m' \mid \hat{\rho}_1 \mid m\,\rangle > 0$, a to znači ako je $|\,m\,\rangle_1$ u oblasti likova od $\hat{\rho}_1$. Zato se u (4.4.19), (4.4.20), i (4.4.21) ograničavamo na svojstvene podbazise od $\hat{\rho}_1$ i $\hat{\rho}_2$ koji obrazuju oblasti likova $\mathcal{R}(\hat{\rho}_1)$, odnosno $\mathcal{R}(\hat{\rho}_2)$.*

***Napomena* 4.4.3** *Lako se vidi da smo mogli poći od proizvoljnog bazisa $\{|\,m\,\rangle_1 | \forall m\} \subset \mathcal{H}_1$ i opet stići do (4.4.37), tako da iz (4.4.37) u stvari možemo izvući zaključak da su vektori $|\,\chi_m\,\rangle_2 \in \mathcal{H}_2$ u parcijalnom razvoju (4.4.36a) ortogonalni ako i samo ako je bazis $\{|\,m\,\rangle_1 | \forall m\} \subset \mathcal{H}_1$ svojstveni bazis od $\hat{\rho}_1$.*

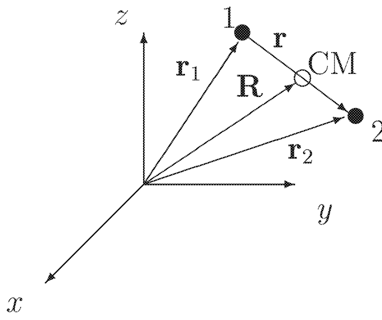
4.5 Problem dve i više čestica

U ovom odeljku suočićemo se sa problemom kako rešiti spregnute dinamičke jednačine dve interagujuće čestice. Podsetićemo se u prva četiri paragrafa kako se u klasičnoj mehanici postiže rasprezanje u vidu efektivnih čestica centra masa i relativne čestice. Zatim ćemo preći na kvantno-mehaničko opisivanje i rešavanje zakona kretanja. Na kraju ćemo skicirati uopštenje na više čestica.

4.5.1 Centar masa i relativna čestica

U prva četiri paragrafa izložićemo ukratko kako se problem dve čestice tretira u klasičnoj mehanici. Pretpostavimo da su date dve čestice[4.5.1], prva sa masom m_1 i koordinatama $\mathbf{r}_1$ i druga sa masom m_2 i položajem $\mathbf{r}_2$.

[4.5.1] U klasičnoj mehanici se umesto o česticama obično govori o materijalnim tačkama. Pošto pripremamo prelazak na kvantno-mehaničko opisivanje, od početka govorimo o česticama.



Slika 4.4: **Geometrija prelaska na centar masa i relativnu česticu**.

Ograničićemo se na najvažniji slučaj u kome potencijal interakcije V zavisi samo od rastojanja čestica, tj. kada je Hamilton-ova funkcija H_{12} vida

$$H_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|), \quad (4.5.1)$$

gde su $\mathbf{p}_1$ i $\mathbf{p}_2$ impulsi.

Sa gledišta rešavanja jednačina kretanja (u Hamilton-ovoj formi) imamo nepovoljnu okolnost što su čestice dinamički *spregnute*, tj. Hamilton-ova funkcija (4.5.1) nije zbir Hamilton-ove funkcije H_1 prve i Hamilton-ove funkcije H_2 druge čestice. Da jeste, rekli bismo da se H_{12} raspada na H_1 i H_2, a za čestice bi rekli da su dinamički raspregnute.

Osnovna ideja rešavanja problema dve čestice sastoji se u tome da se izvrši transformacija kojom se sa realnih čestica prelazi na fiktivne ili *efektivne čestice*, i to takve da se Hamilton-ova funkcija, izražena preko njih, raspada, tj. da se efektivne čestice dinamički rasprežu.

Uvode se efektivne čestice *centar masa* (oznaka CM) i *relativna čestica* (oznaka RČ) tako da im radijus vektori $\mathbf{R}$, odnosno $\mathbf{r}$ glase (uporediti Crtež C 4.4):

$$\mathbf{R} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \qquad \mathbf{r} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1. \quad (4.5.2a,b)$$

Inverzna transformacija, kao što se lako vidi, ima vid

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{r}, \qquad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{r}. \quad (4.5.2c,d)$$

4.5.2 Impulsi efektivnih čestica

Kao što je poznato, impulsi čestice 1 i 2 su u stvari varijable kanonično konjugovane koordinatama i, prema tome, izračunavaju se po formuli $\mathbf{p}_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L_{12}}{\partial \mathbf{v}_i}$, $i = 1, 2$, gde je

$$L_{12} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}m_1 v_1^2 + \frac{1}{2}m_2 v_2^2 - V(\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|) \quad (4.5.3a)$$

Lagrange-ova funkcija sistema, a $\mathbf{v}_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}$ su brzine. Očigledno, $\mathbf{p}_i = m_i\mathbf{v}_i$. S druge strane, potreban i dovoljan uslov za kanoničnu konjugovanost varijabli glasi $[\ \mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\ ] = 1$.

Sad moramo da izračunamo kanonično konjugovane varijable od $\mathbf{R}$ i $\mathbf{r}$, tj. impuls centra masa i relativne čestice. Prethodno moramo Lagrange-ovu funkciju izraziti preko $\mathbf{R}$ i $\mathbf{r}$ i odgovarajućih vremenskih izvoda, tj. brzina

$$\mathbf{V} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\mathbf{R}}{dt}, \qquad \mathbf{v} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\mathbf{r}}{dt}. \quad (4.5.4a,b)$$

Jednakosti (4.5.2) povlače

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{V} - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{v}, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{V} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{v}. \quad (4.5.5a,b)$$

Kad se (4.5.5) zameni u L_{12}, tj. u (4.5.3a), sledi

$$L_{12} = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\mathbf{V}^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{v}^2 - V(\|\mathbf{r}\|). \tag{4.5.3b}$$

Definišimo

$$M \stackrel{\text{def}}{=} m_1 + m_2, \qquad m \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \tag{4.5.6a,b}$$

Iz (4.5.3a) je

$$L_{12} = \frac{1}{2}M\mathbf{V}^2 + \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - V(\|\mathbf{r}\|). \tag{4.5.3c}$$

Iz $\mathbf{P} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L_{12}}{\partial \mathbf{V}}$, $\mathbf{p} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L_{12}}{\partial \mathbf{v}}$ i (4.5.3c) odmah sledi

$$\mathbf{P} = M\mathbf{V}, \qquad \mathbf{p} = m\mathbf{v}, \tag{4.5.7a,b}$$

u punoj analogiji sa slučajem pravih čestica. Veličinu M interpretiramo kao masu sistema, a m kao masu relativne čestice.

Kao što je poznato, dok je Lagrange-ova funkcija razlika kinetičke i potencijalne energije, Hamilton-ova funkcija je njihov zbir. Stoga iz (4.5.3c) i (4.5.7) proizlazi

$$\boxed{H_{12} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r)}, \tag{4.5.8}$$

gde je $r \stackrel{\text{def}}{=} \|\mathbf{r}\|$. Vidimo da je H_{12} zbir od

$$H_{\text{CM}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{P}^2}{2M} \quad \text{i} \quad H_{\text{RČ}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r), \tag{4.5.9a,b}$$

tj. od Hamilton-ovih funkcija pojedinih efektivnih čestica.

Dakle, postigli smo rasprezanje centra masa i relativne čestice, tj. efektivne čestice "ne interaguju". Interakciju pravih čestica pretvorili smo u spoljašnji potencijal $V(r)$ za relativnu česticu (ali izvor ovog potencijala, naravno, nije centar masa!).

4.5.3 Ukupni uglovni moment

Kao što je dobro poznato, ukupni uglovni moment (ili ukupni moment količine kretanja) sistema dve čestice je po definiciji

$$\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 = \mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{p}_2, \tag{4.5.10}$$

gde $\times$ označava vektorski proizvod. Treba da izrazimo ukupni uglovni moment pomoću varijabli efektivnih čestica.

Jednakosti (4.5.5), uz pomoć (4.5.7) i (4.5.6), odmah daju

$$\mathbf{p}_1 = \frac{m_1}{M}\mathbf{P} - \mathbf{p}, \qquad \mathbf{p}_2 = \frac{m_2}{M}\mathbf{P} + \mathbf{p}. \tag{4.5.11a,b}$$

Kad se (4.5.2) i (4.5.11) zamene u (4.5.10), neposredno sledi

$$\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 = \mathbf{L} + \mathbf{l}, \tag{4.5.12a}$$

gde su

$$\mathbf{L} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad \text{i} \quad \mathbf{l} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \qquad (4.5.13a,b)$$

uglovni momenti efektivnih čestica, definisani analogno kao za prave čestice.

Diskusija rezultata (4.5.12a) sa (4.5.13) mora poći od činjenice da $\mathbf{L}$ zavisi od položaja koordinatnog početka (preko $\mathbf{R}$, uporediti Crtež C 4.4), a $\mathbf{l}$ od njega uopšte ne zavisi. Prema tome, vektorska varijabla $\mathbf{L}$ nije ni od kakve važnosti za sistem po sebi. Ona karakteriše odnos centra masa i koordinatnog početka.

Da se izbegne nebitno, najpogodnije je smestiti koordinatni početak u položaj centra masa, što znači $\mathbf{R} = 0$, $\mathbf{L} = 0$ i onda se *ukupni uglovni moment dvočestičnog sistema svodi na uglovni moment relativne čestice* $\mathbf{l}$. Uobičajeno je da se ova pretpostavka čini prećutno (osim ako se naglasi da je drugačije), tj. da važi

$$\boxed{\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 = \mathbf{l}}. \qquad (4.5.12b)$$

4.5.4 Rešenje klasičnih jednačina kretanja

Sve što smo u ovom odeljku do sada iskazali odnosilo se na fiksiran trenutak vremena. Pretpostavimo da u početnom trenutku t_0 osnovne varijable efektivnih čestica imaju date vrednosti (početni uslov): $\mathbf{R}_0$, $\mathbf{P}_0$, $\mathbf{r}_0$, $\mathbf{p}_0$. Da bismo izračunali kako se ove varijable menjaju u vremenu, tj. da bismo našli $\mathbf{R}(t)$, $\mathbf{P}(t)$, $\mathbf{r}(t)$ i $\mathbf{p}(t)$, $\forall t > 0$, moramo rešiti jednačine kretanja, recimo u Hamilton-ovoj formi. One glase

$$\dot{\mathbf{R}} = \frac{\partial H_{12}}{\partial \mathbf{P}}, \qquad \dot{\mathbf{P}} = -\frac{\partial H_{12}}{\partial \mathbf{R}}, \qquad (4.5.14a,b)$$

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H_{12}}{\partial \mathbf{p}}, \qquad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H_{12}}{\partial \mathbf{r}} \qquad (4.5.14c,d)$$

(tačka označava izvod po vremenu). Pogled na (4.5.8) daje

$$\dot{\mathbf{R}} = \frac{1}{M}\mathbf{P}, \qquad \dot{\mathbf{P}} = 0, \qquad (4.5.15a,b)$$

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{m}\mathbf{p}, \qquad \dot{\mathbf{p}} = -\nabla V(r). \qquad (4.5.15c,d)$$

Dakle, rešenje za centar masa glasi $\mathbf{P}(t) = \mathbf{P}_0$, $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}_0 + \mathbf{P}_0 t/M$, tj. centar masa se kreće po inerciji. Na relativnu česticu deluje sila (desna strana od (4.5.15d)) i integraciju jednačina kretanja možemo dovršiti samo ako je eksplicitno zadata konkretna interakcija V(r), tj. kada znamo silu koja deluje.

4.5.5 Prelazak na kvantnu mehaniku

Znamo da se u kvantnoj mehanici dvočestični sistem opisuje vektorima stanja iz orbitnog prostora $\mathcal{H}_{12}^{(o)} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_1^{(o)} \otimes \mathcal{H}_2^{(o)}$ (uporediti § 2.6.8 za $N = 2$). Jednačine (4.5.2) postaju operatorske jednakosti

$$\hat{\mathbf{R}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m_1}{M}\hat{\mathbf{r}}_1 + \frac{m_2}{M}\hat{\mathbf{r}}_2, \qquad \hat{\mathbf{r}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{r}}_2 - \hat{\mathbf{r}}_1, \tag{4.5.16a,b}$$

$$\hat{\mathbf{r}}_1 = \hat{\mathbf{R}} - \frac{m_2}{M}\hat{\mathbf{r}}, \qquad \hat{\mathbf{r}}_2 = \hat{\mathbf{R}} + \frac{m_1}{M}\hat{\mathbf{r}}, \tag{4.5.16c,d}$$

i to kao posledica kvantizacije, u kojoj se varijable zamenjuju hermitskim operatorima tako da sve linearne relacije ostaju sačuvane.

S druge strane, varijable $\mathbf{R}$, $\mathbf{P}$, $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$ čine osnovni skup varijabli u Hamilton-ovom smislu u analogiji sa osnovnim skupom $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{r}_2$ i $\mathbf{p}_2$, od koga smo pošli pri konstrukciji pomenutog prostora stanja $\mathcal{H}_{12}^{(o)}$. Odmah se vidi da Poisson-ove zagrade imaju uobičajen vid

$$[\, X, P_x \,]_{PZ} = \frac{\partial X}{\partial X}\frac{\partial P_x}{\partial P_x} - \ldots - \frac{\partial X}{\partial p_z}\frac{\partial P_x}{\partial z} = 1 \;\text{ itd.} \tag{4.5.17}$$

(podsetimo se da se Poisson-ove zagrade mogu izračunati pomoću bilo kog osnovnog skupa varijabli, a rezultat je jedan te isti). Dakle,

$$[\, R_q, P_{q'} \,]_{PZ} = \delta_{qq'}, \qquad [\, q, p_{q'} \,]_{PZ} = \delta_{qq'} \tag{4.5.18a,b}$$

(Vidi (4.5.18) Poasonovih zagrada nije samo potreban, nego i dovoljan uslov za osnovni skup varijabli.)

Zadatak 4.5.1 Dokazati relacije (4.5.18) izračunavajući Poasonove zagrade pomoću osnovnog skupa varijabli $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{r}_2$ i $\mathbf{p}_2$.

Potpuno analognom logikom kao u § 2.5 možemo konstruisati *orbitne prostore stanja efektivnih čestica*: $\mathcal{H}_{\text{CM}}^{(o)}$ kao prostor obrazovan zajedničkim (uopštenim) svojstvenim bazisom $\{|\,\mathbf{R}\rangle| -\infty < Q < \infty,\; Q = X, Y, Z\}$ potpunog skupa kompatibilnih opservabli $\hat{\mathbf{R}}$ i $\mathcal{H}_{\text{RČ}}^{(o)}$, u kome je $\{|\,\mathbf{r}\rangle| -\infty < q < \infty,\; q = x, y, z\}$ zajednički svojstveni bazis potpunog skupa kompatibilnih opservabli $\hat{\mathbf{r}}$. Ako formiramo direktni proizvod od $\mathcal{H}_{\text{CM}}^{(o)}$ i $\mathcal{H}_{\text{RČ}}^{(o)}$, dobićemo pomenuti dvočestični prostor $\mathcal{H}_{12}^{(o)}$, kao što sledi iz (4.5.16), tj. iz činjenice da parovi $\hat{\mathbf{R}}$, $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{r}}_1$, $\hat{\mathbf{r}}_2$ deluju u istom prostoru (jedni su funkcije od drugih). Dakle, radi se o dvema različitim tenzorskim faktorizacijama prostora $\mathcal{H}_{12}^{(o)}$:

$$\mathcal{H}_1^{(o)} \otimes \mathcal{H}_2^{(o)} = \mathcal{H}_{12}^{(o)} = \mathcal{H}_{\text{CM}}^{(o)} \otimes \mathcal{H}_{\text{RČ}}^{(o)} \tag{4.5.19}$$

.

Zadatak 4.5.2 Pokazati da (uopšteni) dvočestični vektor stanja $|\,\mathbf{P}\,\rangle\,|\,\mathbf{r}\,\rangle \in \mathcal{H}_{12}^{(o)}, ||\mathbf{r}|| \gg 1$, ima osobinu da prediktivno merenje impulsa na prvoj čestici daje određenu vrednost i za impuls druge, udaljene, čestice; ako se umesto impulsa meri (prediktivno) položaj prve čestice, takođe se time ujedno izmeri distantnim merenjem i položaj druge, udaljene, čestice. (Indikacija: Poći od činjenice da pomenuta merenja ne narušavaju oštru vrednost opservable $\hat{\mathbf{P}}$, odnosno $\hat{\mathbf{r}}$, jer je kompatibilna sa merenom opservablom.)

Na ovom primeru su Einstein, Podolsky i Rosen 1935. prvi put[4.5.2] uveli pojam distantnih korelacija (uporediti § 4.4.1).

[4.5.2] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, *Physical Review* **47** (1935) 777.

4.5.6 Efektivne čestice u koordinatnoj reprezentaciji

Sad ćemo da proučimo šta (4.5.19) znači u koordinatnoj reprezentaciji.

Iz (4.5.16) sledi da je vektor $|\,\mathbf{r}_1\rangle\,|\,\mathbf{r}_2\rangle \in \mathcal{H}_{12}^{(o)}$ zajednički svojstveni vektor ne samo za operatore $\hat{\mathbf{r}}_1$ i $\hat{\mathbf{r}}_2$, nego i operatora $\hat{\mathbf{R}}$ i $\hat{\mathbf{r}}$ (sa odgovarajućim svojstvenim vrednostima $\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1+m_2\mathbf{r}_2}{M}$, odnosno $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$). Dakle, svakom paru $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ odgovara par $(\mathbf{R}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2), \mathbf{r}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2))$ bijektivno. Sa gledišta faktorizacije (4.5.19) na prostore efektivnih čestica, isti pravac u $\mathcal{U}(\mathcal{H}_{12}^{(o)})$ obrazuje (uopšteni) vektor $|\,\mathbf{R}\,\rangle\,|\,\mathbf{r}\,\rangle \in \mathcal{H}_{12}^{(o)}$ (sa pomenutim vrednostima $\mathbf{R}$ i $\mathbf{r}$). Pogodnim izborom faznih faktora možemo postići

$$|\,\mathbf{r}_1\,\rangle\,|\,\mathbf{r}_2\,\rangle = |\,\mathbf{R}\,\rangle\,|\,\mathbf{r}\,\rangle, \;\forall\mathbf{r}_1,\;\forall\mathbf{r}_2, \tag{4.5.20}$$

tako da su vrednosti $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ i $\mathbf{R}$, $\mathbf{r}$ korespondenti u smislu (4.5.2). (Obratiti pažnju da na levoj strani od (4.5.20) imamo ispušten $\otimes$ u smislu prve faktorizacije u (4.5.19), a na desnoj strani ispušteni $\otimes$ odgovara drugoj faktorizaciji u (4.5.19).) Pisaćemo, još više skraćeno, (4.5.20) i kao $|\,\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\,\rangle = |\,\mathbf{R}, \mathbf{r}\,\rangle$.

Zadatak 4.5.3 Pokazati da važi jednakost

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathbf{p}}_1\cdot\mathbf{r}_1+\hat{\mathbf{p}}_2\cdot\mathbf{r}_2)} = e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{R}+\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{r})} \tag{4.5.21}$$

za svaki par vrednosti $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ (i korespondentni par $\mathbf{R}$, $\mathbf{r}$) i da iz toga sledi da možemo postići (4.5.20).

Neka je $|\,\lambda\rangle \in \mathcal{H}_{12}^{(o)}$ proizvoljan vektor (λ ovde označava potpun skup kvantnih brojeva) i neka je $\psi_\lambda(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \overset{\text{def}}{=} \langle\,\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\mid\lambda\rangle$ odgovarajući element prostora $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2)$. Izrazimo $\mathbf{r}_1$ i $\mathbf{r}_2$ na levoj strani ove jednakosti pomoću $\mathbf{R}$ i $\mathbf{r}$, koristeći se relacijama (4.5.2c, 4.5.2d) i dobijenu složenu funkciju od $\mathbf{R}$, $\mathbf{r}$ označimo sa $\phi_\lambda(\mathbf{R},\mathbf{r})$. Na desnoj strani iste jednakosti zamenimo $\langle\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\mid$ sa njemu jednakim braom $\langle\mathbf{R},\mathbf{r}\mid$ u smislu (4.5.20). Tako dolazimo do[4.5.3]

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \phi_\lambda(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \langle\,\mathbf{R},\mathbf{r}\mid\lambda\rangle. \tag{4.5.22}$$

Ovo je jednakost vrednosti funkcija za korespondentne argumente — u smislu (4.5.2a, 4.5.2b), a ne jednakost funkcionalnih zavisnosti.

Jednakostima (4.5.19) u koordinatnoj reprezentaciji odgovara

$$\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1)\otimes\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_2) = \mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \cong \mathcal{L}^2(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \mathcal{L}^2(\mathbf{R})\otimes\mathcal{L}^2(\mathbf{r}), \tag{4.5.23}$$

gde su $\mathcal{L}^2(\mathbf{R})$, $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ i $\mathcal{L}^2(\mathbf{R},\mathbf{r})$ prostori po modulu kvadratno integrabilnih funkcija $\varphi_{\text{CM}}(\mathbf{R}) = \langle\,\mathbf{R}\mid\varphi_{\text{CM}}\rangle$, odnosno $\varphi_{\text{RČ}}(\mathbf{r}) = \langle\,\mathbf{r}\mid\varphi_{\text{RČ}}\rangle$, odnosno $\phi(\mathbf{R},\mathbf{r}) \overset{\text{def}}{=} \langle\,\mathbf{R},\mathbf{r}\mid\phi\rangle$, u punoj analogiji sa $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1)$ na primer, a $\cong$ označava izomorfizam uspostavljen prvom jednakošću u (4.5.22).

Zadatak 4.5.4 Pokazati da prva jednakost u (4.5.22) uspostavlja izomorfizam između $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ i $\mathcal{L}^2(\mathbf{R},\mathbf{r})$.

Zadatak 4.5.5 Pokazati da se operacija $\otimes$ direktnog množenja vektora u $\mathcal{L}^2(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \mathcal{L}^2(\mathbf{R})\otimes\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ sastoji u običnom množenju funkcija (Indikacija: osloniti se na analogni slučaj $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1)\otimes\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_2)$, videti (2.8.19) i stav S 2.8.1).

[4.5.3] Notacijom ϕ_λ i ψ_λ želimo da naglasimo različite funkcionalne zavisnosti. Čak i u prostijem slučaju koordinatne i impulsne reprezentacije jedne čestice, ako bismo pisali $\langle\,\mathbf{r}\mid\psi\rangle = \psi(r)$ istovremeno sa $\langle\,\mathbf{p}\mid\psi\rangle = \psi(p)$, notacija bi mogla sugerisati da su $\psi(r)$ i $\psi(p)$ jednake funkcionalne zavisnosti, što nije tačno!

4.5.7 Rešenje kvantno-mehaničkih jednačina kretanja

Vratimo se sad problemu zakona kretanja za dve čestice. Ovaj zakon možemo dobiti direktno prepisujući klasični izraz (4.5.8) na jeziku operatora u $\mathcal{H}_{12}^{(o)} = \mathcal{H}_{\mathrm{CM}}^{(o)} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{R\check{C}}}^{(o)}$ i zamenjujući tako dobijeni hamiltonijan u Schrödinger-ovu jednačinu:

$$\imath\hbar\frac{\partial}{\partial t} \mid \psi_{12}\rangle = \hat{H}_{12} \mid \psi_{12}\rangle = (\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(r)) \mid \psi_{12}\rangle \tag{4.5.24}$$

U pogledu dinamičke podele (§ 3.1.6), naš dvočestični sistem je konzervativan i izolovan, a kad je izražen preko efektivnih čestica kao u (4.5.24) čak imamo dinamičku nezavisnost ili dinamičku raspregnutost centra masa i relativne čestice. Efektivna čestica centra masa se kreće kao slobodna čestica, a relativna čestica kao konzervativna, ali ne i izolovana, već u spoljašnjem polju $\hat{V}(r)$ (osim ako je $\hat{V}(r) \stackrel{\mathrm{def}}{=} 0$.

Kao što znamo iz teorema T 3.2.1, da bismo dobili rešenje za (4.5.24) dovoljno je rešiti svojstveni problem hamiltonijana $\hat{H}_{12}$, tj. naći potpunu klasifikaciju dvočestičnih stanja. Zbog raspregnutosti efektivnih čestica najpogodnije je poći od klasifikacije stanja posebno za centar masa i posebno za relativnu česticu (uporediti analogan slučaj (3.4.16*a*)-(3.4.17*c*)).

Za centar masa pogodno je potpunu klasifikaciju stanja izvršiti pomoću ravnih talasa $\{|\,\mathbf{P}\rangle|\forall\mathbf{P}\}$. Odgovarajući spektar $\{E_{\mathrm{CM}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M}|\forall\mathbf{P}\}$ je čisto kontinualan, tj. centar masa nema ni jedno vezano stanje.

Ako imamo svojstveni vektor hamiltonijana sa odgovarajućom diskretnom i to negativnom vrednošću energije (svojstvene vrednosti hamiltonijana), onda se govori o *vezanom stanju*. Ako imamo pozitivnu vrednost energije i to iz neprekidnog spektra hamiltonijana, onda se odgovarajući (uopšteni) svojstveni vektor naziva *slobodnim stanjem*. Relativna čestica u opštem slučaju može da ima i vezanih i slobodnih stanja, tj. njen ukupni spektar može da se sastoji od diskretnog i od kontinualnog spektra.

Primer za kontinualni spektar relativne čestice imamo pri rasejanju, kada čestica 1 (projektil) pod uticajem čestice 2 (mete) menja svoje stanje, ali ne formira s njom vezano stanje (tj. ne dešava se zahvat). Često je u ovom slučaju pogodnije koristiti se potpunom klasifikacijom stanja pomoću sfernih talasa (uporediti niže, § 6.6.5), nego pomoću ravnih talasa.

Primere za diskretni spektar relativne čestice imamo u slučaju vezanih dvočestičnih sistema. Takav je na primer deuteron, jezgro deuterijuma D, koji se pojavljuje u atomu teške vode D_2O. Deuteron se sastoji od protona i od neutrona. Drugi primer je neutralni atom vodonika, sastoji se od protona i elektrona. Treći primer je molekul od dva atoma itd.

4.5.8 Efektivne čestice u slučaju N čestica

Centar masa N-čestičnog sistema definiše se jednakošću tzv. statičkih momenata (radijus vektora pomnoženih masama):

$$\mathbf{R}_{\mathrm{CM}}(\sum_{n=1}^{N} m_n) = \sum_{n=1}^{N} m_n\mathbf{r}_n, \tag{4.5.25}$$

a to može da se prepiše kao

$$\begin{aligned}&\mathbf{R}_{\mathrm{CM}}(\textstyle\sum_{n=1}^{N} m_n) = (((m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2) + m_3\mathbf{r}_3) + m_4\mathbf{r}_4) + \ldots = \\ &(((m_1 + m_2)\mathbf{R}_{\mathrm{CM}_{12}} + m_3\mathbf{r}_3) + m_4\mathbf{r}_4) + \ldots = ((m_1 + m_2 + m_3)\mathbf{R}_{\mathrm{CM}_{123}} + m_4\mathbf{r}_4) + \ldots,\end{aligned} \tag{4.5.26}$$

gde je sa $\mathrm{CM}_{1\ldots n}$ označen centar mase prvih n čestica.

Na osnovu (4.5.26) može se preći sa N čestica na N efektivnih čestica na sledeći način. Sa prve i druge čestice pređe se na $\mathrm{R\check{C}}_{12}$ i CM_{12} (kao u dvočestičnom problemu). Onda se sa CM_{12} i treće čestice pređe, opet kao u dvočestičnom problemu, na još jednu relativnu česticu i na CM_{123} (kao što se vidi iz (4.5.26)) itd. Na kraju imamo $N-1$ relativnih čestica i centar masa celog sistema. Zbog proizvoljnog redosleda čestica, ovim postupkom se na mnogo načina mogu definisati relativne čestice.

Može se postupiti i malo drugačije. Iz (4.5.25) takoreći neposredno sledi sledeća lema.

Lema 4.5.1 *Grupišimo naših N čestica na izvestan način u K klasa sa po N_k, $k=1,\ldots,K$, čestica u pojedinim klasama ($\sum_{k=1}^{K} N_k = N$). Neka su $\mathbf{R}_k$ i M_k radijus vektor i masa centra masa k-te klase čestica, a $\mathbf{R}$ i M odgovarajuće veličine celog sistema. Onda važi*

$$M\mathbf{R} = \sum_{k=1}^{K} M_k \mathbf{R}_k \tag{4.5.27}$$

tj. sa intermedijernih centara masa CM_k pojedinih klasa se prelazi na centar masa sistema analognom formulom kao sa prvobitnih čestica.

Na osnovu Leme L 4.5.1 možemo razdeliti sistem čestica u klase i unutar svake od njih preći sa N_k čestica u klasi na N_k-1 relativnih čestica i CM_k, na primer gore opisanim postupkom. Onda sa intermedijernih efektivnih čestica CM_1, CM_2,… CM_K dalje opet prelazimo na relativne čestice i na (sve obuhvatnije) centre masa nekim načinom kao za čestice. Opet ćemo na kraju dobiti $N-1$ relativnih čestica i centar masa celog sistema.

Ispostavlja se (nećemo to dokazivati) da kako god uveli $N-1$ relativnih čestica sa radijus vektorima $\boldsymbol{\varrho}_1$, $\boldsymbol{\varrho}_2,\ldots,$ $\boldsymbol{\varrho}_{N-1}$, masama μ_1, $\mu_2,\ldots,\mu_{N-1}$ i impulsima $\mathbf{P}_1$, $\mathbf{P}_2,\ldots,\mathbf{P}_{N-1}$ i centar masa sa $\mathbf{R}$, M i $\mathbf{P}$, važiće kako uopštenje formule (4.5.12a) za uglovne momente

$$\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{r}_n \times \mathbf{p}_n) = \mathbf{R}\times\mathbf{P} + \sum_{i=1}^{N-1}(\boldsymbol{\varrho}_i \times \mathbf{P}_i), \tag{4.5.28}$$

tako i uopštenje formule (4.5.8) za Hamilton-ovu funkciju

$$H_{12\ldots N} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + (\sum_{i=1}^{N-1}\frac{\mathbf{P}_i^2}{2\mu_i} + V(\boldsymbol{\varrho}_1,\ldots \boldsymbol{\varrho}_{N-1})). \tag{4.5.29}$$

Dakle, u opštem slučaju samo se centar masa celog sistema, dinamički raspreže od $N-1$ relativnih čestica, a ove sa svoje strane ostaju dinamički spregnute. Prelazak na kvantnu mehaniku je analogan kao u dvočestičnom problemu.

Glava 5

GALILEJEVE TRANSFORMACIJE

5.1 Proširena Galilejeva grupa

Započećemo odeljak pojmovima inercijalnog koordinatnog sistema i inercijalnog kretanja. Zatim ćemo podsetiti na definiciju Galilejevih transformacija i inverzija, koje zajedno obrazuju proširenu Galilejevu grupu. Koren ove grupe leži, s jedne strane, u geometriji prostor-vremena i u inercijalnom kretanju, a s druge strane u Galilejevom principu relativiteta. Objasnićemo aktivnu i pasivnu interpretaciju pojedinih transformacija. Pripremajući se za kvantizaciju proširene Galilejeve grupe, tj. za njeno prenošenje u kvantnu mehaniku (koje ćemo izvršiti u sledećem odeljku), ukazaćemo na mogućnost generisanja Galilejevih transformacija pomoću eksponencijalnih operatorskih funkcija zasnovanih na Poisson-ovim zagradama. Na kraju, definisaćemo dotične transformacije u više prostora i proučićemo veze između njih.

5.1.1 * Inercijalni koordinatni sistem

Klasična mehanika je nauka o kretanju fizičkih sistema. Pri opisivanju kretanja se zapravo radi o tome kako određeni posmatrač (opserver) vidi dotični fizički sistem u prostoru i vremenu.

Fizika je egzaktna nauka, te se pojam "posmatrača" mora precizno i objektivno definisati. Tako se dolazi do poznatog pojma *koordinatnog* ili *referentnog sistema*. Strogo uzev, posmatrač je više od koordinatnog sistema; tu je i aktivni subjekat (ali mogao bi biti i robot) koji vrši merenja, prikuplja informaciju itd. Ali uobičajeno je da se ovaj "višak" apstrahuje i, za potrebe klasične mehanike, posmatrač redukuje na referentni sistem.

Ista fizička pojava izgleda različito u različitim koordinatnim sistemima i čak može da se ispoljava složenije ili prostije zavisno od referentnog sistema. Očigledno je važno naći kriterijum najpogodnijeg izbora koordinatnog sistema za što širu klasu fizičkih fenomena.

Fizičke pojave odvijaju se u prostoru i vremenu. Složenost opisivanja pojava osetno zavisi od toga kako se složeno pojavljuje sam prostor i vreme u viđenju opservera. Vreme poprima najveću jednostavnost za posmatrača za koga su svi vremenski trenuci *a priori* (tj. pre nego što se dese određeni fizički događaji) ravnopravni, nerazličivi. Ta se osobina naziva *homogenošću vremena*. Analogna jednostavnost prostora je u *a priori* ravnopravnosti ili nerazličivosti svih položaja — što se naziva *homogenošću prostora*. Drugi vid jednostavnog ispoljavanja prostora imamo ako su u njemu svi pravci koji prolaze kroz fiksiranu tačku ravnopravni — što se naziva *izotropnošću*

prostora (u odnosu na tu tačku). (Videti precizniju definiciju homogenosti i izotropnosti u § 5.1.7.) Ako je prostor homogen i izotropan u odnosu na jednu tačku, onda je izotropan u odnosu na svaku tačku.

Koordinatni sistem u kome je vreme homogeno, a prostor homogen i izotropan naziva se *inercijalnim koordinatnim sistemom.* Takav referentni sistem stvarno daje najjednostavnije opisivanje najvećeg broja pojava. Pre svega, u njemu se materijalna tačka na koju ne deluje sila[5.1.1], kreće pravolinijski konstantnom brzinom (ili u specijalnom slučaju miruje), tj. vrši tzv. *inercijalno kretanje.* Ovo je u stvari potreban i dovoljan uslov (ili druga definicija) za inercijalni referentni sistem.

Inercijalnih koordinatnih sistema ima (kontinualno beskonačno) mnogo. Sa jednog na drugi prelazi se transformacijom iz tzv. proširene Galilejeve grupe, koja je stoga grupa relativiteta klasične mehanike (videti § 5.1.7).

5.1.2 Galilejeve transformacije

Kao što je poznato u klasičnoj mehanici, svaka tzv. *Galilejeva transformacija* određena je sa 4 entiteta: jednom 3×3 realnom ortogonalnom[5.1.2] matricom R jedinične determinante (koja se naziva matricom rotacije), vektorom brzine $\mathbf{v}$, vektorom prostorne translacije $\mathbf{a}$ i realnim brojem vremenske translacije b. Oznaka je $T_{(b,\mathbf{a},\mathbf{v},R)}$.

Galilejeva transformacija deluje na sledeći način na vektor položaja $\mathbf{r}$, na trenutak t i na impuls $\mathbf{p}$ klasične čestice:

$$T_{(b,\mathbf{a},\mathbf{v},R)}\mathbf{r} = R\mathbf{r} + \mathbf{a} - \mathbf{v}t, \quad T_{(b,\mathbf{a},\mathbf{v},R)}t = t + b, \quad T_{(b,\mathbf{a},\mathbf{v},R)}\mathbf{p} = R\mathbf{p} - m\mathbf{v}. \qquad (5.1.1a,b,c)$$

Pod $R\mathbf{r}$, na primer, podrazumeva se matrični proizvod 3×3 matrice R sa 3×1 matricom (ili brojnom kolonom) vektora $\mathbf{r}$, koja se sastoji od apscise x, ordinate y i od aplikate z. Sa m je označena masa čestice.

Zadatak 5.1.1 Pokazati da identična transformacija glasi $T_{(0,\mathbf{0},\mathbf{0},I)}$, gde je sa $\mathbf{0}$ označen nulti vektor, a sa I jedinična 3×3 matrica.

Kada su u četvorci $(b, \mathbf{a}, \mathbf{v}, R)$ svi entiteti nulti (zapravo $R = I$ a ne nula) osim jednog, onda se u oznaci transformacije ispisuje samo taj jedan.

Zadatak 5.1.2 Pokazati da važi

$$T_{(b,\mathbf{a},\mathbf{v},R)} = T_b T_{\mathbf{a}} T_{\mathbf{v}} T_R, \qquad (5.1.2)$$

gde na DS-i imamo proizvod transformacija, koji se u stvari sastoji u uzastopnoj primeni.

Četvorka $(b, \mathbf{a}, \mathbf{v}, R)$ naziva se *Lie-jevim parametrima* transformacije. Za svaki izbor Lie-jevih parametara (unutar gornjih definicija) postoji Galilejeva transformacija. Uzastopna primena (proizvod) bilo koje dve Galilejeve transformacije opet daje Galilejevu transformaciju prema obrascu

$$T_{(b',\mathbf{a}',\mathbf{v}',R')}T_{(b,\mathbf{a},\mathbf{v},R)} = T_{(b'+b,\mathbf{a}'+R'\mathbf{a}-\mathbf{v}'b,\mathbf{v}'+R'\mathbf{v},R'R)}. \qquad (5.1.3)$$

[5.1.1] Ovde pod silom podrazumevamo pravu silu, koja ima svoj izvor u nekom fizičkom sistemu i za koji važi zakon akcije i reakcije (a ne na inercijalnu silu, koja je prividna i pojavljuje se samo u neinercijalnom koordinatnom sistemu).

[5.1.2] Matrica R se naziva ortogonalnom ako $R^{-1} = R^T$, tj. ako je njena inverzna matrica jednaka transponovanoj.

Svaka Galilejeva transformacija je nesingularna (tj. predstavlja obostrano jednoznačno, ceo-na-ceo preslikavanje). Inverzna transformacija $T^{-1}_{(b,\mathbf{a},\mathbf{v},R)}$ proizvoljne trensformacije $T_{(b,\mathbf{a},\mathbf{v},R))}$, kao što je poznato, zadovoljava

$$T^{-1}T = TT^{-1} = T_{(0,\mathbf{0},\mathbf{0},I)} \tag{5.1.4}$$

(na LS-i smo izostavili Lie-jeve parametre).

Zadatak 5.1.3 Dokazati formulu

$$T^{-1}_{(b,\mathbf{a},\mathbf{v},R)} = T_{(-b,-R^{-1}(\mathbf{a}+\mathbf{v}b),-R^{-1}\mathbf{v},R^{-1})}. \tag{5.1.5}$$

Čitaocu je već očigledno da Galilejeve transformacije čine grupu. To je tzv. *Galilejeva grupa*, obeležavaćemo je sa $\mathcal{G}$. Pošto su elementi grupe zadati Lie-jevim parametrima i množenje u grupi se izražava pomoću operacija sa Lie-jevim parametrima (uporediti (5.1.3)), Galilejeva grupa spada među tzv. Lie-jeve grupe.

5.1.3 Osnovne podgrupe Galilejeve grupe

Na DS-i jednakosti (5.1.2) pojavljuju se prosti specijalni slučajevi Galilejevih transformacija. Transformacije T_R nazivaju se rotacijama, $T_\mathbf{v}$ *boost*-ovima (*boost* — čitati: bust — na engleskom znači: pogurnuti uvis) ili specijalnim Galilejevim transformacijama, T_b vremenskim translacijama, a $T_\mathbf{a}$ prostornim translacijama. Uobičajene su oznake

$$\mathrm{R}(3) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \{T_R \mid \forall R\},\ \mathrm{T}_3^{(v)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \{T_\mathbf{v} \mid \forall \mathbf{v}\}, \tag{5.1.6a,b}$$

$$\mathrm{T}_3 \stackrel{\mathrm{def}}{=} \{T_\mathbf{a} \mid \forall \mathbf{a}\},\ \mathrm{T}_1 \stackrel{\mathrm{def}}{=} \{T_b \mid -\infty < b < \infty\}. \tag{5.1.6c,d}$$

Zadatak 5.1.4 Pokazati da su skupovi $\mathrm{R}(3)$, $\mathrm{T}_3^{(v)}$, T_3 i T_1 grupe.

Dakle, rotaciona grupa $\mathrm{R}(3)$, grupa specijalnih Galilejevih transformacija $\mathrm{T}_3^{(v)}$, grupa prostornih translacija T_3 i grupa vremenskih translacija T_1 su *osnovne podgrupe* od $\mathcal{G}$. Broj koji se pojavljuje u oznaci podgrupe pokazuje koliki je broj Lie-jevih parametara podgrupe. Neočigledno je samo da je $\mathrm{R}(3)$ troparametarska. U to ćemo se uveriti u narednoj glavi.

Od velike je važnosti najmanja podgrupa od $\mathcal{G}$ koja sadrži samo $\mathrm{R}(3)$ i T_3 od osnovnih podgrupa. To je tzv. *Euklidova grupa* $\mathrm{E}(3)$. (Ovde se broj 3 odnosi na dimenziju prostora u kome deluju transformacije. Broj Lie-jevih parametara je 6.)

Cela Galilejeva grupa $\mathcal{G}$, kao i svaka njena pomenuta podgrupa, je kao što se kaže, *kontinualna* (neprekidna) i povezana. To će reći da se kontinualnim menjanjem Lie-jevih parametara dotične transformacije može stići (prelazeći druge Galilejeve transformacije) do identične transformacije $T_{(0,\mathbf{0},\mathbf{0},I)}$. Sa suprotnim slučajem diskretnih transformacija upoznaćemo se u sledećem paragrafu.

5.1.4 Diskretne transformacije i proširena Galilejeva grupa

Inverzija prostora ili *prostorna inverzija* $\mathcal{J}_p$ definisana je sledećim delovanjem

$$\mathcal{J}_p\mathbf{r} \stackrel{\text{def}}{=} -\mathbf{r}, \quad \mathcal{J}_p t \stackrel{\text{def}}{=} t, \quad \mathcal{J}_p\mathbf{p} = -\mathbf{p}. \qquad (5.1.7a,b,c)$$

Inverzija vremena ili *vremenska inverzija* $\mathcal{J}_v$ je po definiciji sledeća transformacija:

$$\mathcal{J}_v\mathbf{r} = \mathbf{r}, \quad \mathcal{J}_v t \stackrel{\text{def}}{=} -t, \quad \mathcal{J}_v\mathbf{p} = -\mathbf{p}. \qquad (5.1.8a,b,c)$$

Za obe inverzije se često kaže da su *diskretne* transformacije. Naime, uopšte nemaju Lie-jeve parametre i, stoga se, na prvi pogled, ne može od njih kontinualno stići do druge transformacije. Međutim, detaljna analiza pokazuje da stvari stoje malo drugačije.

Najmanja podgrupa grupe svih transformacija (faznog prostora i vremenske ose materijalne tačke) koja pored $\mathcal{G}$ sadrži i $\mathcal{J}_p$ i $\mathcal{J}_v$ naziva se *proširenom Galilejevom grupom.* Obeležavaćemo je sa $\overline{\mathcal{G}}$. Označavajući sa T tekuću Galilejevu transformaciju, može se reći da se $\overline{\mathcal{G}}$ sastoji od 4 vrste transformacija; od Galilejevih transformacija T, od transformacija vida $T\mathcal{J}_p$, od transformacija koje se pišu kao $T\mathcal{J}_v$ i, najzad, od transformacija koje glase $T\mathcal{J}_p\mathcal{J}_v$. Diskretna transformacija $\mathcal{J}_p\mathcal{J}_v$ je tzv. *jaka inverzija.* Cela proširena Galilejeva grupa $\overline{\mathcal{G}}$ je unija četiri disjunktna skupa:

$$\overline{\mathcal{G}} = \mathcal{G} + \mathcal{G}\mathcal{J}_p + \mathcal{G}\mathcal{J}_v + \mathcal{G}\mathcal{J}_p\mathcal{J}_v.$$

Svaki sabirak (podskup u $\overline{\mathcal{G}}$) naziva se susednom klasom u teoriji grupa. Svaka od pomenute četiri susedne klase je povezana, tj. neprekidnom promenom Lie-jevih parametara (od T) može se preći sa bilo kog elementa na bilo koji drugi u istoj klasi. Ali grupa $\overline{\mathcal{G}}$ nije povezana.

U sledećem paragrafu prodiskutovaćemo dvostruku fizičku interpretaciju transformacija iz $\overline{\mathcal{G}}$.

5.1.5 * Aktivna i pasivna interpretacija transformacija iz T_3, T_1 i $\mathrm{T}_3^{(v)}$

Svim transformacijama koje smo diskutovali u prethodnim paragrafima može se dati tzv. *aktivna interpretacija*, u kojoj se pretpostavlja da je fiksiran koordinatni sistem (uključujući nulti trenutak vremena), tj. da je referentni sistem jedan te isti pre i posle delovanja transformacije. U ovoj interpretaciji se zamišlja da se transformacije "dešavaju" u objektivnom fizičkom prostor-vremenu[5.1.3], a transformacije iz prethodnih paragrafa opisuju kako takvu promenu vidi dati posmatrač (ograničavamo se, naravno, na inercijalnog posmatrača).

Međutim, moguća je i druga, tzv. *pasivna interpretacija* transformacija iz $\mathcal{G}$. Tu se pretpostavlja da se u objektivnom prostor-vremenu ništa ne "dešava" sa fizičkim sistemima, ali da postoje dva različita koordinatna sistema i da se drugi dobija iz prvog inverznom transformacijom $T^{-1} \in \mathcal{G}$ u objektivnom prostor-vremenu. Primena transformacije T na $\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$, t se onda tumači kao preslikavanje ili prevođenje viđenja fenomena od strane prvog posmatrača u viđenje

[5.1.3] Objektivni prostor, za razliku od subjektivnog prostora brojnih kolona $\mathbf{r}$ kojim se služi posmatrač, u klasičnoj fizici se obično ne definiše matematički precizno. Pre nego što se fiksira koordinatni sistem, to nije linearni prostor, već samo tzv. afini prostor, čiji je jedini element strukture rastojanje. Čitalac, ako želi, može da pročita više o matematičkoj strukturi afinog prostora u poslednjoj glavi knjige: А. Т. Мальцев, *Основы Линейной Алгебры* (Наука, Москва 1975), treće, prerađeno izdanje, Nauka, Moskva, 1970 (u ranijim izdanjima nema ove partije).

istih fenomena od strane drugog posmatrača. Pod "viđenjem" ovde podrazumevamo odražavanje objektivnih događaja u subjektivnom faznom prostoru i vremenu posmatrača pripisivanjem po 7 realnih brojeva $\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$, t tim događajima.

Očigledan je smisao prostornih translacija u aktivnoj interpretaciji. Pri pasivnoj interpretaciji prostornih translacija pretpostavlja se da je koordinatni početak drugog posmatrača (i samo to) pomeren za $-\mathbf{a}$ u odnosu na koordinatni početak prvog; prema tome, položaj koji prvom posmatraču izgleda da je u vrhu radijus-vektora $\mathbf{r}$, drugom posmatraču izgleda da je u vrhu radijus-vektora $\mathbf{r} + \mathbf{a}$.

Moguće su dve aktivne interpretacije vremenskih translacija. U prvoj, koju ćemo nazivati *nespontanom*, po uzoru na aktivnu interpretaciju prostornih translacija, opserver vrši — bar u mislima — translaciju vremena po objektivnoj apsolutnoj vremenskoj osi kada to zaželi i za veličinu b koju odabere. U drugoj aktivnoj interpretaciji, koju ćemo nazivati *spontanom*, radi se o spontanom i nezaustavivom proticanju vremena u prirodi, koje se ogleda u vremenskoj evoluciji svih fizičkih sistema.

U pasivnoj interpretaciji vremenskih translacija pretpostavljamo da je nulti trenutak drugog posmatrača (i samo to) pomeren za $-b$ u odnosu na nulti trenutak prvog posmatrača.

Specijalnim Galilejevim transformacijama možemo dati aktivnu interpretaciju po kojoj svaka materijalna tačka (ma gde se nalazila) u trenutku $t = 0$ skokom promeni svoju brzinu za fiksirani vektor $-\mathbf{v}$. Ovo je, naravno, matematička konstrukcija bez dubljeg fizičkog smisla.

Kada dajemo pasivnu interpretaciju *boost*-ovima, onda pretpostavljamo da se u trenutku $t = 0$ koordinatni sistem 2 poklapao sa koordinatnim sistemom 1 u položaju, smerovima i orijentaciji koordinatnih osa (oba su desna ili oba leva, videti Crtež C 5.1 niže), kao i u izboru nultog trenutka, ali da se referentni sistem 2 kretao u odnosu na referentni sistem 1 konstantnom brzinom $\mathbf{v}$.

Čitalac je svakako zapazio da "dešavanje" pišemo u navodnicima. Razlog tome leži u činjenici što su sva navedena preslikavanja kojima aktivno interpretiramo transformacije iz $\overline{\mathcal{G}}$ u stvari fiktivna; možemo ih samo zamisliti, a ne i fizički ostvariti. Ovo nije slučaj sa svim pasivnim interpretacijama, osim za boost-ove, i sa spontanom aktivnom interpretacijom vremenske translacije. (Tu se radi o ostvarivim dešavanjima.)

5.1.6 Aktivna i pasivna interpretacija rotacija i inverzija

Što se rotacija tiče, one se interpretiraju aktivno ili pasivno u analogiji sa slučajem translacija. Prepustićemo detalje čitaocu.

Prodiskutovaćemo matematičku stranu nerazličivosti aktivne i pasivne interpretacije. Zamislimo objektivni prostor (matematički: apstraktni prostor) u kome je fiksiran koordinatni sistem (bazis) $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ i neka tu deluje rotacija $\hat{R}$. Poznata formula za reprezentovanje rotacije $\hat{R}$ matricom R u pomenutom bazisu glasi

$$\hat{R}\mathbf{a}_k = \sum_{k'=1}^{3} R_{k'k}\mathbf{a}_{k'}. \tag{5.1.9}$$

Trojka brojeva $\mathbf{r}$ u istom bazisu reprezentuje tekuću tačku objektivnog prostora, a $R\mathbf{r}$ reprezentuje lik te tačke dobijen delovanjem rotacije $\hat{R}$. To je aktivna interpretacija.

Uzmimo sad inverznu od gornje rotacije, tj. $\hat{R}^{-1}$, u objektivnom prostoru i pomoću nje generišimo drugi bazis:

$$\mathbf{b}_k \stackrel{\text{def}}{=} \hat{R}^{-1}\mathbf{a}_k, \; k = 1,2,3. \tag{5.1.10}$$

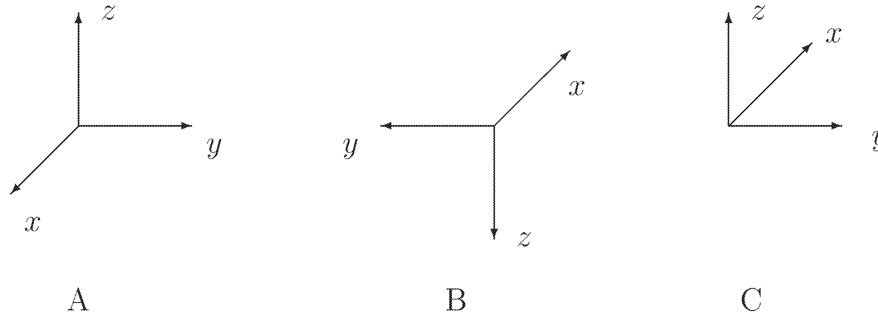
Iz (5.1.9) i (5.1.10) sledi

$$\mathbf{b}_k = \sum_{k'=1}^{3} R^{-1}_{k'k}\mathbf{a}_{k'}, \tag{5.1.11}$$

što znači da je matrica razvoja drugog bazisa po prvom $(R^{-1})^T$ (T znači transponovanje), tj. kontragredijentna matrica od R. Onda, kao što je poznato, ako tačku objektivnog prostora u prvom bazisu $\{\mathbf{a}_k \mid k = 1,2,3\}$, reprezentuje brojna kolona $\mathbf{r}$, istu tačku u drugom bazisu $\{\mathbf{b}_k \mid k = 1,2,3\}$ reprezentuje brojna kolona $R\mathbf{r}$. To je pasivna interpretacija.

Zadatak 5.1.5 Pokazati da je $\mathcal{J}_p$, što se tiče delovanja na $\mathbf{r}$, takođe matrica 3×3. Koja je to matrica?

Za prostornu inverziju $\mathcal{J}_p$ važi sve što je rečeno za rotacije. Proučićemo detaljnije fizičku stranu dveju interpretacija za $\mathcal{J}_p$.



Slika 5.1: **Levi i desni koordinatni sistem**.

U slučaju pasivne interpretacije prostorne inverzije prelazi se sa jednog, npr. sa uobičajenog desnog koordinatnog sistema, na drugi, na primer na levi (videti Crtež C 5.1.A odnosno C 5.1.B). Obratiti pažnju da su ortovi desnog referentnog sistema uzajamno raspoređeni (orijentisani) po uzoru na desni (tj. uobičajeni) zavrtanj: vrtenje od orta x-ose najmanjim uglom ka ortu y-ose izazivalo bi pomeranje zavrtnja u smeru orta z-ose. Kod levog koordinatnog sistema *mutatis mutandis* uzor je levi zavrtanj.

Zadatak 5.1.6 Uveriti se da se levi i desni koordinatni sistem ne mogu dobiti rotacijom jedan iz drugog, a da se dva leva koordinatna sistema sa istim početkom (npr. C 5.1.B i C 5.1.C) mogu.

U aktivnoj interpretaciji prostorna inverzija se u stvari odigrava u objektivnom prostoru (matematički: u apstraktnom prostoru) i deluje na sve osim na fiksirani koordinatni sistem opservera. Pasivna interpretacija je izvodljiva: možemo preći sa opisivanja fenomena iz desnog koordinatnog sistema na opisivanje iz levog ili obratno.

5.1.7 * Inercijalni koordinatni sistemi i proširena Galilejeva grupa kao grupa relativiteta

Kao što smo rekli u paragrafu § 5.1.1, inercijalni koordinatni sistem može da se prepozna po tome što materijalna tačka koja se kreće po inerciji ima u njemu konstantan (u vremenu) impuls. Svaka transformacija iz $\overline{\mathcal{G}}$ preslikava konstantan impuls u konstantan impuls.

Zadatak 5.1.7 Dokazati ovaj iskaz.

Dakle, ako primenimo transformaciju iz $\overline{\mathcal{G}}$ na ortove inercijalnog koordinatnog sistema, opet ćemo dobiti inercijalni referentni sistem. Ispostavlja se da je $\overline{\mathcal{G}}$ najobuhvatnija grupa transformacija koje iz jednog inercijalnog koordinatnog sistema generišu druge analogne referentne sisteme.

Zadatak 5.1.8 Prodiskutovati inercijalne koordinatne sisteme koji su fiktivni, tj. fizički neostvarivi, a dobijaju se primenom neke transformacije iz $\overline{\mathcal{G}}$ na fizički ostvarivi inercijalni referentni sistem.

Imajući u vidu pomenutu ulogu grupe $\overline{\mathcal{G}}$ u generisanju svih inercijalnih koordinatnih sistema iz jednog od njih, govori se o $\overline{\mathcal{G}}$ kao o *grupi relativiteta* klasične mehanike. Izražavajući istu misao, govori se i o opštem Galilejevom principu relativiteta. Ova relativistička uloga grupe $\overline{\mathcal{G}}$ (ne mešati ovo sa relativističkom fizikom, u kojoj ulogu $\overline{\mathcal{G}}$ preuzima proširena Poincare-ova grupa) je u najužoj vezi sa pasivnom interpretacijom transformacija.

Pri aktivnoj interpretaciji transformacija iz $\overline{\mathcal{G}}$ ima se u vidu nepromenjenost forme Hamiltonovih jednakosti kretanja (to je tzv. kanoničnost ovih transformacija, u koju mi nismo ulazili). Na osnovu toga govori se o opštem Galilejevom principu invarijantnosti.

Sad ćemo da damo jednu teorijski koncizniju ekvivalentnu definiciju pojmova homogenosti i izotropnosti, koje smo pomenuli u § 5.1.1.

Homogenost prostora i vremena se u aktivnoj interpretaciji sastoji u tome što su grupe T_3 i T_1 grupe automorfizama (izomorfizama) objektivnog prostor-vremena (na samog sebe). Drugim rečima, dotične transformacije održavaju rastojanje. Analogno, izotropnost prostora je u tome što je i rotaciona grupa R(3) grupa automorfizama prostora.

U pasivnoj interpretaciji homogenost prostor-vremena i izotropnost prostora ogledaju se u tome što bilo kojom transformacijom iz T_3 i T_1 odnosno iz R(3) prelazimo sa inercijalnog koordinatnog sistema na isti takav referentni sistem.

Kao što je čitaocu verovatno jasno, grupe T_3, T_1 i R(3) i transformacije $\mathcal{J}_p$ i $\mathcal{J}_v$ igraju osnovniju ulogu nego $\mathrm{T}_3^{(v)}$. One su geometrijske grupe i transformacije, vezane za geometrijsku strukturu prostor-vremena. Grupa $\mathrm{T}_3^{(v)}$ je kinematička, pošto je u vezi sa kinematičkim stanjem ili stanjem (inercijalnog) kretanja koordinatnog sistema. Sve transformacije iz $\overline{\mathcal{G}}$ nazivaćemo *kinematičkim transformacijama* (podrazumevajući da "kinematički" sadrži "geometrijski" kao specijalni slučaj).

5.1.8 Generisanje Galilejevih transformacija pomoću eksponencijalnih operatorskih funkcija

U odeljku § 2.5, pri izlaganju kvantizacije klasičnih varijabli u kvantno-mehaničke operatore, istakli smo činjenicu da su neki nestandardni aspekti klasične mehanike od osnovnog značaja za

prelazak na kvantnu mehaniku. Prvi primer bile su Poisson-ove zagrade. Sada ćemo ukazati na drugi primer, koji se nadgrađuje na Poisson-ove zagrade.

Kao što je poznato, transformacije faznog prostora klasičnog sistema pod kojima su Hamilton-ove jednačine kretanja i Poisson-ove zagrade invarijantne nazivaju se kanoničnim transformacijama. Jednoparametarske grupe kanoničnih transformacija mogu se generisati sa po jednom varijablom uz korišćenje po jednog parametra.

Neka su $A(\mathbf{r},\mathbf{p})$ i $G(\mathbf{r},\mathbf{p})$, dve varijable (jednočestičnog sistema) i to neka je A tekuća, a G fiksirana varijabla. Definišimo operator $\tilde{G}$ koji deluje u skupu svih varijabli A (koje su analitičke funkcije na faznom prostoru) na sledeći način:

$$\boxed{\tilde{G}A \stackrel{\text{def}}{=} [\,G, A\,]_{\text{PZ}}},\ \forall A(\mathbf{r},\mathbf{p}), \tag{5.1.12}$$

a pod $e^{\theta\tilde{G}}$ podrazumevaćemo operatorsku funkciju

$$\boxed{e^{\theta\tilde{G}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\theta^n \tilde{G}^n}{n!}} \tag{5.1.13}$$

($\tilde{G}^n$ je n puta uzastopno primenjeno $\tilde{G}$). Skup $\{e^{\theta\tilde{G}} \mid -\infty < \theta < \infty\}$ je jednoparametarska Liejeva grupa kanoničnih transformacija definisanih, kao što smo rekli, na skupu varijabli $A(\mathbf{r},\mathbf{p})$. Tu spadaju i 6 varijabli osnovnog skupa: $x = x(\mathbf{r},\mathbf{p}), \ldots, p_z = p_z(\mathbf{r},\mathbf{p})$, gde, na primer, $x(\mathbf{r},\mathbf{p})$ znači uzeti apscisu u tački $(\mathbf{r},\mathbf{p})$ faznog prostora.

Obeležavajući sa $H = \frac{p^2}{2m}$ Hamilton-ovu funkciju slobodne čestice, a sa m njenu masu, ispostavlja se da se delovanje neprekidnih Galilejevih transformacija reprodukuje u prostoru varijabli (na faznom prostoru) materijalne tačke pomoću eksponencijalnih funkcija operatora na sledeći način[5.1.4,5.1.5]:

$$\boxed{e^{-\mathbf{a}\cdot\tilde{\mathbf{p}}}q = q + a_q},\ q = x, y, z; \tag{5.1.14a}$$

$$\boxed{e^{-b\tilde{H}}q = q + b\frac{p_q}{m}},\ q = x, y, z; \tag{5.1.15a}$$

$$\boxed{e^{-\boldsymbol{\phi}\cdot\tilde{\mathbf{l}}}q = \sum_{q'=x}^{z} R_{qq'}(\phi)q'},\ q = x, y, z; \tag{5.1.16a}$$

$$\boxed{e^{\mathbf{v}\cdot m\tilde{\mathbf{r}}}q = q},\ q = x, y, z. \tag{5.1.17a}$$

[5.1.4] Nećemo dokazivati relacije (5.1.14a)-(5.1.17b). Čitaoca koji želi da se bliže upozna sa ovom materijom upućujemo na veoma zanimljivu knjigu: E. C. G. Sudarshan and N. Mukunda, *Classical Dynamics: A Modern Perspective*, John Wiley and Sons, New York, 1974. Ova knjiga predstavlja moderan i nestandardan pogled na klasičnu mehaniku sa gledišta simetrija i teorije grupa, a po inspiraciji iz kvantne mehanike. Kao drugu referencu na Galilejevu grupu pomenućemo *Group Theory and Its Applications*, Volume II, Editor E. M. Loebl, Academic Press, New York, 1971; poslednja glava. Kao treću referencu navešćemo: L. Fonda and G. C. Ghirardi, *Symmetry Principles in Quantum Physics*, Marcel Dekker, New York, 1970.

[5.1.5] Lako je videti da je na primer $e^{-\mathbf{a}\cdot\tilde{\mathbf{p}}} = e^{-a_x\tilde{p}_x}e^{-a_y\tilde{p}_y}e^{-a_z\tilde{p}_z}$, a podgrupe $\{e^{-a_q\tilde{p}_q} \mid -\infty < a_q < \infty\}$, $q = x, y, z$, su jednoparametarske. Drugim rečima, troparametarske grupe T_3, $\text{R}(3)$ i $\text{T}_3^{(v)}$ svode se na prirodan način na jednoparametarske podgrupe. U stvari samo kod $\text{R}(3)$, koja nije komutativna, ovo svođenje nije trivijalno (nije direktni proizvod jednoparametarskih podgrupa kao kod T_3 i $\text{T}_3^{(v)}$), naime: $e^{-\boldsymbol{\phi}\cdot\tilde{\mathbf{l}}} = e^{-\phi_x\tilde{l}_x-\phi_y\tilde{l}_y-\phi_z\tilde{l}_z} \neq e^{-\phi_x\tilde{l}_x}e^{-\phi_y\tilde{l}_y}e^{-\phi_z\tilde{l}_z}$.

U impulsnom prostoru imamo analogno:

$$e^{-\mathbf{a}\cdot\tilde{\mathbf{p}}}p_q = p_q,\ \ q = x, y, z; \tag{5.1.14b}$$

$$e^{-b\tilde{H}}p_q = p_q,\ \ q = x, y, z; \tag{5.1.15b}$$

$$e^{-\boldsymbol{\phi}\cdot\tilde{\mathbf{l}}}p_q = \sum_{q'=x}^{z} R_{qq'}(\boldsymbol{\phi})p_{q'},\ \ q = x, y, z; \tag{5.1.16b}$$

$$e^{\mathbf{v}\cdot m\tilde{\mathbf{r}}}p_q = p_q - mv_q,\ \ q = x, y, z. \tag{5.1.17b}$$

Zadatak 5.1.9 Dokazati (5.1.14*b*) i (5.1.14*a*) (uporediti Primedbu 5.1.5).

Za sada nije definisan vektor $\boldsymbol{\phi}$, koji daje parametrizaciju grupe R(3). Njega ćemo definisati i proučiti niže, u odeljku § 6.1. Vektorska varijabla $\mathbf{l}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ je uglovni moment čestice, tj. vektorski proizvod $\mathbf{l} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r} \times \mathbf{p}$.

Pažljivi čitalac je zapazio da su relacije (5.1.15*a*)-(5.1.15*b*) u stvari zakon kretanja slobodne čestice u inercijalnom koordinatnom sistemu u skladu sa spontanom aktivnom interpretacijom vremenskih translacija.

Na kraju paragrafa, rezimirajmo koje su osnovne podgrupe Galilejeve grupe $\mathcal{G}$ i koje su varijable odgovarajući generatori:

$$\boxed{\mathrm{T}_3 \leftrightarrow \mathbf{p};\ \mathrm{T}_1 \leftrightarrow H;\ \mathrm{R}(3) \leftrightarrow \mathbf{l};\ \mathrm{T}_3^{(v)} \leftrightarrow m\mathbf{r}}. \tag{5.1.18}$$

Dakle, tu su osnovne varijable $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$ i njihove najvažnije funkcije $\mathbf{l}$ i H. U smislu (5.1.18) govori se o *fundamentalnoj paralelnosti* transformacija simetrije s jedne strane i najvažnijih varijabli sa druge strane. Videćemo da se ova paralelnost prenosi u kvantnu mehaniku[5.1.6].

5.1.9 * Izomorfizmi i antiizomorfizmi izmedju grupa transformacija u različitim prostorima

U paragrafima § 5.1.5 do § 5.1.7 tvrdili smo da je svejedno hoćemo li interpretirati pojedine transformacije aktivno ili pasivno. U sveopštoj pripremi za kvantizaciju Galilejevih transformacija moramo i ovo stanovište dalje precizirati.

Pokazalo se svrsishodnim da se pri izboru interpretacije *zahteva izomorfnost* grupa transformacija, što u suštini znači "jednako" delovanje dotičnih grupa kao celina. Na primer, kada $\overline{\mathcal{G}}$ uzimamo u aktivnoj interpretaciji, tj. kao grupu transformacija kinematičke simetrije objektivnog prostor-vremena, i definišemo transformacije $T \in \overline{\mathcal{G}}$ u faznom prostoru, imamo izomorfizam grupe u objektivnom prostoru na grupu u faznom prostoru. Dakle, ovde je aktivna interpretacija potpuno zadovoljavajuća, tj. ona je usklađena sa zahtevom izomorfnosti (videti desnu kolonu Crteža C 5.2).

To već nije slučaj sa pasivnom interpretacijom. Sada se $\overline{\mathcal{G}}$ u objektivnom prostor-vremenu pojavljuje u pasivnoj ulozi grupe relativiteta, delujući na inercijalne koordinatne sisteme (kvadrat I

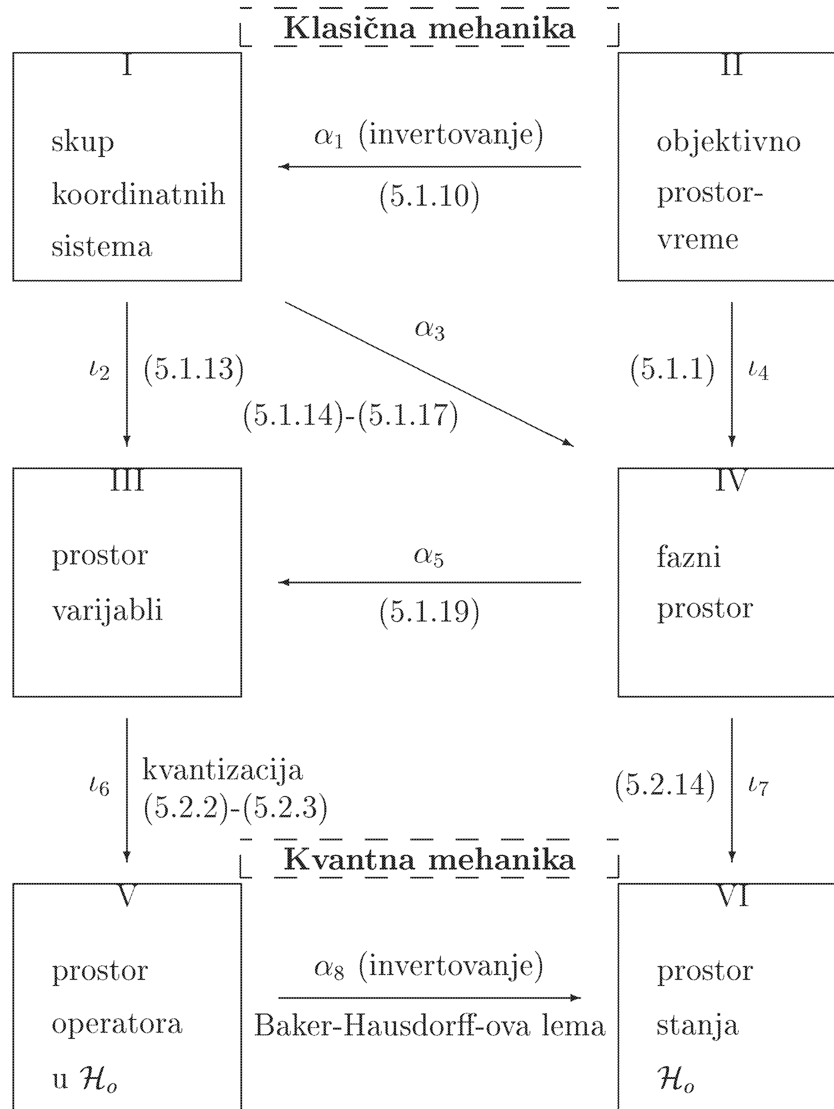
[5.1.6]* Sa tačke gledišta formalizma treba istaći da neprekidne transformacije čine Lie-jeve grupe, a varijable koje ih generišu čine Lie-jeve algebre sa Poissonovom zagradom kao Lie-jevim proizvodom.

na Crtežu C 5.2), a pojedine transformacije se pri tome invertuju. Invertovanje je antizomorfizam (tj. ne održava već obrće poredak množenja elemenata u grupi), te je grupa $\overline{\mathcal{G}}$ u faznom prostoru (kvadrat IV) antiizomorfna grupi relativiteta. Stoga pasivna interpretacija grupe $\overline{\mathcal{G}}$ u faznom prostoru ne zadovoljava gornji zahtev izomorfnosti.

Pređimo sad na prostor varijabli i na Galilejeve transformacije koje se pojavljuju na levoj strani jednačina (5.1.14a)-(5.1.17b) (tj. koje deluju u kvadratu III).

Kao što se čitalac može lako uveriti (npr. na podskupu osnovnih varijabli), transformacije $T \in \overline{\mathcal{G}}$ sad deluju na varijable kao na funkcije (tj. funkcionalne zavisnosti) na faznom prostoru i to kao transformacije $\mathbb{T}$ indukovane na sledeći način:

$$\mathbb{T}A(\mathbf{r},\mathbf{p}) = A(T\mathbf{r},T\mathbf{p}),\ \forall T \in \overline{\mathcal{G}},\ \forall A(\mathbf{r},\mathbf{p}). \tag{5.1.19}$$



Slika 5.2: **Aktivna i pasivna interpretacija transformacija**. Leva kolona *(kvadrati I, III i V i izomorfizmi ι_2 i ι_6) daje elemente za pasivnu,* a desna kolona *(kvadrati II, IV i VI i izomorfizmi ι_4 i ι_7) za aktivnu interpretaciju grupa $E(3)$ i $T_3^{(v)}$. Antiizomorfizmi α_1, α_3, α_5 i α_8, kao i izomorfizmi ι_2, ι_4, ι_6 i ι_7 povezuju osnovne podgrupe Galilejeve grupe koje deluju u skupovima označenim sa I do VI. Specijalno: $\iota_2 \stackrel{\text{def}}{=} \alpha_5 \circ \alpha_3 = \alpha_5 \circ \iota_4 \circ \alpha_1^{-1}$; $\alpha_3 = \iota_4 \circ \iota_1$ je prevođenje viđenja između dva opservera); ι_4 je reprezentovanje u fiksiranom koordinatnom sistemu sa implikacijama u impulsnom prostoru.*

Čitalac može lako proveriti za bilo koju od osnovnih podgrupa od $\mathcal{G}$ da je pridruživanje $T \mapsto \mathbb{T}$ dato sa (5.1.19) antiizomorfizam dotične podgrupe koja deluje u faznom prostoru (kvadrat IV) na "istu" podgrupu koja deluje u prostoru varijabli (kvadrat III).

Što se tiče cele grupe $\mathcal{G}$, (5.1.19) nije antiizomorfizam, jer se pri prelasku sa faznog prostora na prostor varijabli poremećuje odnos podgrupe $\mathrm{T}_3^{(v)}$ sa ostalim osnovnim podgrupama od $\mathcal{G}$. To u stvari potiče od nekomutiranja operatora $\tilde{\mathbf{p}}$ i $\tilde{\mathbf{r}}$ (u (5.1.14*a*),(5.1.14*b*),(5.1.17*a*) odnosno (5.1.17*b*); videti više o ovome ispod (5.2.18) i u prvim dvema referencama iz Primedbe 5.1.4).

Dakle, seljenje grupe iz faznog prostora u prostor varijabli (označeno sa "5" na Crtežu C 5.2), koje predstavlja presudan korak uoči kvantizacije klasičnih transformacija (kao što ćemo videti u sledećem odeljku), primorava nas da se odreknemo grupe $\mathcal{G}$ ili $\overline{\mathcal{G}}$ kao celine. Umesto o $\overline{\mathcal{G}}$, govorićemo posebno o E(3) i posebno o $\mathrm{T}_3^{(v)}$. Pri tome T_1 izostavljamo, jer za nju je najvažnija spontana aktivna interpretacija, a nju smo već obradili u glavi 3. Involucije $\mathcal{J}_p$ i $\mathcal{J}_v$ izostavljamo arbitrerno.

Iz rečenog se vidi da u prostoru varijabli (kvadrat III) aktivna interpretacija geometrijske grupe E(3), koja polazi od delovanja ove grupe u objektivnom prostor-vremenu (u kvadratu II), ne zadovoljava zahtev izomorfizma. Međutim, pasivna interpretacija (pri kojoj se polazi od delovanja E(3) u kvadratu I) zadovoljava, jer dva antiizomorfizma se množe u izomorfizam (uporediti Crtež C 5.2). Na Crtežu C 5.2 leva kolona prikazuje pasivnu interpretaciju za $\mathrm{T}_3^{(v)}$ i E(3), a desna kolona nam predočava aktivnu interpretaciju istih grupa. Kao što smo rekli, iz fizičkih razloga za $\mathrm{T}_3^{(v)}$ je samo pasivna interpretacija prirodna, a za E(3) prirodne su obe. Međutim, kao što ćemo videti u sledećem odeljku, u slučaju Euklidove grupe prednost se daje aktivnoj interpretaciji. Ova konvencija možda potiče od važne uloge koju fazni prostor igra u definiciji osnovnog skupa opservabli.

5.2 Galilejeve transformacije u kvantnoj mehanici

Počećemo odeljak proučavanjem opšteg pojma transformacije simetrije u kvantnoj mehanici. Objasnićemo značajni teorem Wigner-a po kome se svaka transformacija simetrije može izraziti unitarnim ili antiunitarnim operatorom u prostoru stanja kvantnog sistema. Zatim ćemo kvantovati pojedine Galilejeve transformacije, tj. izrazićemo ih u vidu operatora u kvantno-mehaničkom prostoru stanja. Na kraju ćemo detaljnije prodiskutovati operatore prostornih translacija i specijalnih Galilejevih transformacija i nabacićemo način konstrukcije operatora Galilejevih transformacija u prostoru stanja višečestičnog kvantnog sistema.

Vremenske translacije su u stvari već bile detaljno proučene u § 3.1, pa ih se u ovom odeljku samo dotičemo (u § 5.2.5). Operatorima rotacije i opservablama uglovnog momenta biće posvećena sledeća glava. Operatore diskretnih kinematičkih transformacija ćemo uvesti tek nakon što savladamo teoriju rotacija i uglovnih momenata.

5.2.1 Pojam transformacije simetrije u kvantnoj mehanici

U Hamilton-ovoj formi klasične mehanike transformacije simetrije su kanonične transformacije. U prethodnom odeljku podsetili smo se na kanonične transformacije koje su najvažnije sa gledišta

kvantne mehanike: na Galilejeve transformacije i na inverziju prostora i vremena.

Postavlja se pitanje šta u kvantnoj mehanici odgovara kanoničnim transformacijama, tj. šta je tu najšira klasa transformacija simetrije.

U paragrafu § 2.1.2, u Postulatu o stanjima, videli smo da svi vektori u prostoru stanja $\mathcal{H}$ koji pripadaju jednom te istom pravcu (tj. jednodimenzionalnom potprostoru) u $\mathcal{H}$ imaju isti fizički smisao: opisuju (nakon normiranja) jedan te isti homogeni ansambl kvantnih sistema. Obeležimo sa $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ *prostor svih pravaca*[5.2.1] u $\mathcal{H}$. Na osnovu pomenutog Postulata, $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ je u biunivokoj korespondenciji sa skupom svih mogućih čistih kvantnih ansambala.

Može se smatrati da je *verovatnoća prelaza*, uvedena u § 2.4.7, binarna operacija u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$: za svaka dva pravca $p_1, p_2 \in \mathcal{P}(\mathcal{H})$ definisan je broj iz intervala $[0, 1]$ jednak $|\langle \psi \mid \phi \rangle|^2$, gde su $\mid \psi \rangle \in p_1$ i $\mid \phi \rangle \in p_2$ normirani vektori.

Opšta transformacija simetrije u kvantnoj mehanici definiše se kao transformacija (tj. biunivoko ceo-na-ceo preslikavanje, ili bijekcija) u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ koja održava verovatnoću prelaza, tj. ako pravac p_1 prevodi u p'_1 i p_2 u p'_2, onda imamo

$$|\langle \psi \mid \phi \rangle|^2 = |\langle \psi' \mid \phi' \rangle|^2, \ \mid \psi \rangle \in p_1, \ \mid \phi \rangle \in p_2, \ \mid \psi' \rangle \in p'_1, \ \mid \phi' \rangle \in p'_2. \qquad (5.2.1)$$

Mi ćemo niže (u § 5.2.3 i § 5.2.4) preći sa klasičnih kinematičkih transformacija na operatore u $\mathcal{H}$, i uverićemo se da oni u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ indukuju transformacije za koje važi (5.2.1), tj. transformacije simetrije[5.2.2].

Fizički smisao zahteva održanja verovatnoće prelaza ćemo najlakše razumeti ako se ograničimo na neku Galilejevu transformaciju i opredelimo za pasivnu interpretaciju. Neka su O i O' dva opservera, oba sa inercijalnim koordinatnim sistemom. Pošto normirani vektor predstavlja viđenje čistog kvantnog ansambla od strane datog posmatrača[5.2.3], jedan čisti ansambl će opserver O opisivati recimo sa $\mid \psi \rangle$, a opserver O' će taj isti ansambl opisivati recimo sa $\mid \psi' \rangle$. Isto tako, nakon određenog selektivnog kompletnog merenja (što je premisa "prelaza" $\mid \psi \rangle \to \mid \phi \rangle$ u (5.2.1), videti § 2.4.7), posmatrač O će nastali ansambl opisivati stanjem $\mid \phi \rangle$ recimo, a posmatrač O' recimo stanjem $\mid \phi' \rangle$.

Pošto je verovatnoća prelaza empirijski relativna frekvencija (broj događaja podeljen brojem sistema u ansamblu), ona mora biti ista za oba opservera. To je smisao zahteva (5.2.1).

Preostaje nam da vidimo kako se konkretno ostvaruje *prenošenje* klasičnih transformacija u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$. Videli smo u paragrafu § 2.4.6, kada smo iskazno upotpunili Postulat o stanjima, da svojstvene vrednosti potpunog skupa kompatibilnih opservabli uspostavljaju vezu između elemenata od $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ i laboratorijske preparacije homogenih kvantnih ansambala. Možemo to iskoristiti za prenošenje klasičnih transformacija u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$. Na primer, pošto je za jednu česticu potpuni skup kompatibilnih opservabli $\hat{\mathbf{r}}$, onda tački $\mathbf{r}$ klasičnog konfiguracionog prostora odgovara pravac $p \in \mathcal{P}(\mathcal{H})$ kome pripada $\mid \mathbf{r} \rangle$. Ako jedna transformacija preslikava $\mathbf{r}$ u $\mathbf{r}'$, onda u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ njoj pridružujemo (tj. prenosimo je u) transformaciju koja prevodi pravac od $\mid \mathbf{r} \rangle$ u pravac od $\mid \mathbf{r}' \rangle$. Prosledićemo ovu misao kroz najvažnije primere transformacija.

[5.2.1] Tzv. *projektivni prostor*; engleski *ray space* (čitati rej spejs); ruski *проективное пространство*.

[5.2.2] Među upravo definisane kvantno-mehaničke transformacije simetrije spadaju sve klasične kanonične transformacije (posle kvantizacije), a potencijalno "ima mesta" i za nove, čisto kvantno-mehaničke transformacije simetrije.

[5.2.3] Strogo uzevši, ovaj iskaz je pooštrenje Postulata o stanjima iz § 2.1.2. Iziskuje ga činjenica da je za kvantno-mehaničko opisivanje jednog kvantnog ansambla neophodno da postoji i opserver sa datim inercijalnim koordinatnim sistemom. On je u stvari zamišljeni izvršilac kvantnih merenja, čije rezultate predskazuje kvantna mehanika.

5.2.2 Wigner-ov teorem o (anti)unitarnim operatorima simetrije

Pošto je sav kvantno-mehanički formalizam formulisan u prostoru stanja $\mathcal{H}$, a ne u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$, neophodno je preneti "suviše apstraktne" transformacije simetrije iz $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ u $\mathcal{H}$ i tu ih pretvoriti u operatore[5.2.4]. Pri tome nameće nam se pitanje da li će operatori simetrije u $\mathcal{H}$ imati lepe matematičke osobine, kao što je to na primer slučaj sa hermitskim operatorima koji predstavljaju opservable.

Odgovor na ovo pitanje daje sledeći teorem, za čiji dokaz upućujemo na literaturu[5.2.5].

Teorem 5.2.1 (Wigner-ov teorem) *A. Svaka transformacija simetrije u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ može da se prenese u Hilbert-ov prostor $\mathcal{H}$ tako da postane ili unitarni operator $\hat{U}$ ili antiunitarni operator $\hat{U}_a$.*
B. Višeznačnost prenošenja u pomenuti operator sastoji se tačno u proizvoljnom faznom faktoru, tj. na primer sa operatorom $\hat{U}$ i operator $e^{\imath\lambda}\hat{U}$ — za svaki realan λ — i nijedan drugi operator pomenutog tipa, indukuje u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ jednu te istu transformaciju simetrije.

Skupovi $\{e^{\imath\lambda}\hat{T} \mid 0 \leq \lambda < 2\pi\}$ svih unitarnih (ili antiunitarnih) operatora iz pravca (jednodimenzionalnog potprostora) operatora koji obrazuje unitarni $\hat{T} = \hat{U}$ (ili antiunitarni $\hat{T} = \hat{U}_a$) u linearnom prostoru operatora su pravi reprezentanti pojedinih transformacija simetrije. Radi o tzv. projektivnim reprezentacijama.

Ako hoćemo da dobijemo običnu reprezentaciju, onda moramo iz svakog skupa operatora izabrati po jedan operator ali tako da dobijemo izomorfnu grupu. To nije uvek moguće. Ispostavlja se da to jeste moguće za pojedine podgrupe Galilejeve grupe: za T_3, T_1, R(3) i $\mathrm{T}_3^{(v)}$ i čak i E(3), ali ne i za celu grupu $\mathcal{G}$ (niti za proširenu Galilejevu grupu $\overline{\mathcal{G}}$).

5.2.3 Kvantizacija Galilejevih transformacija — početak

Kada sa Galilejevih transformacija u klasičnoj mehanici želimo da pređemo na kvantno-mehaničke operatore u prostoru stanja $\mathcal{H}$ kvantnog sistema, pogodno je poći od jednakosti (5.1.14*a*)-(5.1.17*b*). One su u takvoj formi da je Postulat o kvantizaciji (iz § 2.5.3) neposredno primenljiv na njih. Naime, u njima osnovnu ulogu igraju Poisson-ove zagrade, a znamo da njih treba zameniti komutatorom (pomnoženim sa $-\frac{\imath}{\hbar}$).

Pođimo od prve jednakosti u sistemu jednakosti (5.1.14*a*): $e^{-\mathbf{a}\cdot\tilde{\mathbf{p}}}x = x + a_x$. Ona se svodi na (uporediti sa primedbom 5.1.5):

$$e^{-a_x\tilde{p}_x}x = x + a_x. \tag{5.2.2}$$

Kvantizacijom ova jednakost prelazi u

$$e^{\frac{\imath}{\hbar}a_x\hat{\tilde{p}}_x}\hat{x} = \hat{x} + a_x, \tag{5.2.3}$$

[5.2.4] Preciznije, za datu transformaciju u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ treba naći linearni operator u $\mathcal{H}$ takav da održava verovatnoću prelaza i da, pošto nužno prevodi svaki pravac na pravac, indukuje u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ upravo transformaciju od koje smo pošli.

[5.2.5] Originalni Wigner-ov dokaz je poboljšan u radu V. Bargmann, *Journal of Mathematical Physics*, **5** (1964) 862.

gde je $\hat{x}$ opservabla apscise čestice u orbitnom prostoru $\mathcal{H}_o$, a $\hat{\hat{p}}_x$ je operator koji deluje na operatore na sledeći način:

$$\hat{\hat{p}}_x \hat{x} \stackrel{\text{def}}{=} [\ \hat{p}_x, \hat{x}\ ]. \tag{5.2.4}$$

Operatoru $\hat{A}$ pridružujemo tzv. *superoperator* $\hat{\hat{A}}$ koji na svaki operator $\hat{B}$ u $\mathcal{H}_o$ deluje na sledeći način:

$$\hat{\hat{A}}(\hat{B}) \stackrel{\text{def}}{=} [\ \hat{A}, \hat{B}\ ]. \tag{5.2.5}$$

Treba zapaziti da smo pri prelasku sa (5.2.2) na (5.2.3) iskoristili $e^{-a_x\tilde{p}_x} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a_x\tilde{p}_x)^n}{n!}$, a prema zahtevima 3), 1), 2) i 4) Postulata o kvantizaciji, celokupni red održava formu pri prelasku na kvantno-mehaničke operatore, a $\tilde{p}_x$ prelazi u $\hat{\hat{p}}_x$. Tako dobijamo $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a_x\hat{\hat{p}}_x)^n}{n!} \stackrel{\text{def}}{=} e^{-a_x\hat{\hat{p}}_x}$.

Superoperatori su ne samo složeni entiteti, nego i deluju na pogrešne objekte. Nama su potrebni operatori u $\mathcal{H}_o$, a ne u operatorskom prostoru. Zato ćemo superoperatore smatrati intermedijarnim korakom bez neposrednog značaja za našu svrhu.

Da bismo izvršili poslednji korak, oslonićemo se na sledeću lemu, koja se u matematici naziva *Baker-Hausdorff-ovom*[5.2.6] lemom (dokazaćemo je u Dodatku § 5.2.10).

Lema 5.2.1 *Neka su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ dva operatora u nekom Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}$ takva da je definisan operator $e^{\hat{\hat{B}}}\hat{A}$, pri čemu je $\hat{\hat{B}}\hat{A} \stackrel{\text{def}}{=} [\ \hat{B}, \hat{A}\ ]$. Onda važi*

$$e^{\hat{\hat{B}}}\hat{A} = e^{\hat{B}}\hat{A}e^{-\hat{B}}. \tag{5.2.6}$$

Obratiti pažnju da na LS-i od (5.2.6) imamo superoperator $e^{\hat{\hat{B}}}$, eksponencijalnu funkciju od superoperatora $\hat{\hat{B}}$, koji deluje na $\hat{A}$ (preko komutatora), a na DS-i od (5.2.6) imamo proizvod tri operatora.

Na osnovu (5.2.6), (5.2.3) možemo da prepišemo u vidu

$$e^{\frac{i}{\hbar}a_x\hat{p}_x}\hat{x}e^{-\frac{i}{\hbar}a_x\hat{p}_x} = \hat{x} + a_x, \tag{5.2.7}$$

a (obični) operator $e^{\frac{i}{\hbar}a_x\hat{p}_x}$ deluje (kao i $\hat{x}$) na vektore u $\mathcal{H}_o$. Pošto je $\frac{i}{\hbar}a_x\hat{p}_x$ kosohermitski operator, lako se vidi da je $e^{\frac{i}{\hbar}a_x\hat{p}_x}$ unitaran operator.

U paragrafu § 5.2.9 ćemo se uveriti da svaka klasična transformacija koja je element povezane grupe kvantizacijom prelazi u unitaran operator. Prema tome, svaka *Galilejeva transformacija* postaje *unitaran operator* u kvantnoj mehanici.

Na Crtežu niže dodat je i kvantno-mehanički deo na C 5.2. Upravo opisano pridruživanje $e^{-a_x\tilde{p}_x} \mapsto e^{\frac{i}{\hbar}a_x\hat{p}_x}$ je primer izomorfizma "6" na Crtežu. Sad moramo detaljnije proučiti kako treba preći na primenu transformacije u prostoru stanja $\mathcal{H}_o$.

Setimo se Schrödinger-ove i Heisenberg-ove slike zakona kretanja, koji je za konzervativan sistem u stvari translacija u vremenu, znači Galilejeva transformacija iz T_1. Prirodno je očekivati da ćemo i transformacije iz E(3) ili $\mathrm{T}_3^{(v)}$ primenjivati ili na vektore stanja a na operatore ne, ili, umesto toga, na operatore a na vektore stanja ne. A prelazak sa jedne verzije na drugu se ostvaruje invertovanjem (α_8 na Crtežu C 5.2).

I stvarno je tako, kao što sledi iz činjenice da se u kvantnoj mehanici sve merljivo svodi na matrične elemente operatora, tj. na izraze vida $(\psi, \hat{A}\phi)$. Oni će se jednako menjati bilo da

[5.2.6] Čitati: Bejke, Hausdorf.

primenimo operator $\hat{U}$ na vektore: $(\hat{U}\psi, \hat{A}\hat{U}\phi)$, bilo da primenimo inverzni operator $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$ (jer je $\hat{U}$ unitaran ili antiunitaran) na operator: $(\psi, \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}\phi)$, što je jednako sa $(\hat{U}\psi, \hat{A}\hat{U}\phi)$.

Kao što se vidi, na Crtežu C 5.2, desna kolona odgovara aktivnoj interpretaciji dejstva grupe E(3), koja je u kvantnoj mehanici više uobičajena. Samo što smo mi išli umesto kraticom ι_7 (o kojoj će biti reči niže, naročito za diskretne transformacije) dužim putem α_8 posle ι_6 posle α_5 da bi iskoristili već poznatu kvantizaciju varijabli.

Leva kolona na crtežu daje drugu alternativu, pasivnu interpretaciju, tj. tumačenje E(3) ili $\mathrm{T}_3^{(v)}$ kao grupe relativiteta. Kao što smo videli u prethodnom odeljku, za $\mathrm{T}_3^{(v)}$ ova interpretacija je jedina prirodna.

Dijagram je komutativan, tj. npr. α_8 posle ι_6 posle α_5 jednako je ι_7, itd. Kvadrati I, II, III i IV spadaju u klasičnu fiziku, a V i VI u kvantnu mehaniku.

5.2.4 Kvantizacija Galilejevih transformacija — završetak

Kao što smo rekli, što se tiče E(3) uobičajeno je da se u kvantnoj mehanici daje prednost aktivnoj interpretaciji (desna kolona na Crtežu), jer ona prirodno uključuje fazni prostor iz koga crpimo osnovni skup opservabli u $\mathcal{H}_o$. U prethodnom paragrafu smo se uverili da iz toga onda sledi da se odlučujemo za *Schrödinger-ovu verziju* primene operatora E(3) u $\mathcal{H}_o$. Nasuprot tome, za $\mathrm{T}_3^{(v)}$ je prirodna samo pasivna interpretacija (leva kolona na Crtežu). U ovom slučaju je nužna *Heisenberg-ova verzija* primene (inverznih) operatora transformacijom sličnosti (samo) na operatore u $\mathcal{H}_o$.

U našem primeru translacije za a_x, izomorfizam "6" na Crtežu je, kao što smo videli, pretvorio $e^{-a_x\tilde{p}_x}$ u $e^{\frac{i}{\hbar}a_x\hat{p}_x}$, koji transformacijom sličnosti deluje na operatore u $\mathcal{H}_o$ (tj. u kvadratu V). Ako izvršimo antiizomorfizam "8" posle "6", očigledno dobijamo $e^{-\frac{i}{\hbar}a_x\hat{p}_x}$ u $\mathcal{H}_o$ (deluje u kvadratu VI).

Na osnovu (5.1.14a), (5.1.15a) i (5.1.16a), sad možemo odmah da zaključimo da "8" posle "6" posle "5" daje sledeće pridruživanje:

$$\boxed{T_{\mathbf{a}} \mapsto e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}_{\mathbf{a}}}, \ \forall\mathbf{a}; \tag{5.2.8}$$

$$\boxed{T_b \mapsto e^{-\frac{i}{\hbar}b\hat{H}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}_b}, \ \forall b \tag{5.2.9}$$

(gde je $\hat{H}$ hamiltonijan slobodne čestice, radi se o aktivnoj nespontanoj interpretaciji — uporediti pred kraj od § 5.1.5);

$$\boxed{R \mapsto e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\phi}\cdot\hat{\mathbf{l}}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}(\boldsymbol{\phi})}, \tag{5.2.10}$$

gde je $R = T_R$ rotacija, a $\hat{\mathbf{l}}$ vektorski operator orbitnog uglovnog momenta u $\mathcal{H}_o$ (pobliže u § 6.5).

Kao što je rečeno, za transformacije $T_{\mathbf{v}} \in \mathrm{T}_3^{(v)}$ prednost dajemo pasivnoj interpretaciji i Heisenberg-ovoj verziji primene ovih operatora na prostor operatora koji deluju u $\mathcal{H}_o$ (kao $\hat{U}...\hat{U}^{-1}$). Kvantizacijom (5.1.17a) dolazimo do (pošto sad "8" na Crtežu otpada):

$$\boxed{T_{\mathbf{v}} \mapsto e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{v}\cdot m\hat{\mathbf{r}}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}_{\mathbf{v}}}, \ \forall\mathbf{v}. \tag{5.2.11}$$

Pošto dve operatorske eksponencijalne funkcije komutiraju ako i samo ako komutiraju operatori u njihovim eksponentima (uporediti dokaz od K 6.4.3), iz (5.2.8) i (5.2.11) se vidi da $\hat{U}_{\mathbf{a}}$ i $\hat{U}_{\mathbf{v}}$

ne komutiraju. Isto je važilo u klasičnom prostoru varijabli, jer Poisson-ove zagrade su analogoni komutatora (uporediti § 5.1.9). S druge strane, svaka transformacija iz T_3 komutira sa svakom transformacijom iz $T_3^{(v)}$. Stoga nismo mogli $\mathcal{G}$ izomorfno (ili antiizomorfno) preneti u prostor varijabli niti u kvantnu mehaniku[5.2.7], već smo je morali rastaviti na $T_3^{(v)}$ i $E(3) \otimes T_1$.

5.2.5 Operatori translacije u kvantnoj mehanici

Što se tiče vremenskih translacija, videli smo da se polazi od spontane aktivne interpretacije i da se kvantizacijom dobija evolucioni operator, koji smo detaljno proučili u odeljku § 3.1. I vremenske translacije u nespontanoj aktivnoj interpretaciji (uporediti § 5.1.5) igraju izvesnu ulogu u kvantnoj mehanici, mada ne u vidu operatora. Njima smo se koristili u § 3.1.6 da bismo ideju homogenosti vremenske ose izrazili na jeziku evolucionog operatora.

Pokazali smo ranije (videti § 2.5.15) da u jednoj dimenziji važi $\hat{U}^{-1}(q)\hat{x}\hat{U}(q) = \hat{x} + q$. Ako umesto q pišemo a_x, ovo se u tri dimenzije očigledno proširuje na:

$$\boxed{\hat{U}_{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{r}}\hat{U}_{\mathbf{a}}^{-1} = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}}\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{a}} \tag{5.2.12}$$

(naravno, iskoristili smo i jednakost $\hat{U}^{-1}(a_x) = \hat{U}(-a_x)$ i zamenili $-a_x$ sa a_x). Pošto je translacioni operator funkcija $\hat{\mathbf{p}}$, odmah sledi:

$$\boxed{\hat{U}_{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{p}}\hat{U}_{\mathbf{a}}^{-1} = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}}\hat{\mathbf{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}} = \hat{\mathbf{p}}}. \tag{5.2.13}$$

Tako, znači, deluju operatori translacije prostora $\hat{U}_{\mathbf{a}}$ na osnovni skup opservabli u orbitnom prostoru stanja $\mathcal{H}_o$ čestice. To je, naravno, unutar Schrödinger-ove verzije formalno delovanje.

Na (uopštene) vektore svojstvenog bazisa kompletne vektorske opservable $\hat{\mathbf{r}}$ operatori prostornih translacija deluju na sledeći način:

$$\boxed{\hat{U}_{\mathbf{a}} \mid \mathbf{r}\,\rangle = \mid \mathbf{r} + \mathbf{a}\,\rangle}, \quad \forall \mathbf{a}, \forall \mathbf{r}. \tag{5.2.14}$$

To odmah sledi iz fazne konvencije za ovaj bazis, naime, $\hat{U}_{\mathbf{a}} \mid r\,\rangle = \hat{U}_{\mathbf{a}} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}} \mid \mathbf{r} = 0\,\rangle = \hat{U}_{\mathbf{a}}\hat{U}_{\mathbf{r}} \mid \mathbf{r} = 0\,\rangle = \hat{U}_{\mathbf{a}+\mathbf{r}} \mid \mathbf{r} = 0\,\rangle = \mid \mathbf{r} + \mathbf{a}\,\rangle$ (za faznu konvenciju videti (2.6.10)).

S druge strane, na (uopštene) svojstvene vektore kompletne vektorske opservable $\hat{\mathbf{p}}$ operatori translacija prostora deluju na sledeći način:

$$\hat{U}_{\mathbf{a}} \mid \mathbf{p}\,\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}} \mid \mathbf{p}\,\rangle, \quad \forall \mathbf{a}, \ \forall \mathbf{p} \tag{5.2.15}$$

(pošto se radi o svojstvenim vektorima i za $\hat{U}_{\mathbf{a}}$).

Kada pogledamo formule (5.2.14) i (5.2.15), vidimo da u $\mathcal{P}(\mathcal{H}_o)$ translacije deluju upravo onako kako smo rekli (na kraju od § 5.2.1). Mogli smo se koristiti ovim prenošenjem iz faznog prostora u $\mathcal{P}(\mathcal{H}_o)$ i zatim u $\mathcal{H}_o$ umesto našeg kvantovanja Galilejeve grupe. Ovaj put ćemo izabrati za diskretne transformacije. Tu se u stvari radi o izomorfizmu "7" sa Crteža, tj. o kratici koju smo zaobišli (da bi naš prelazak na operatore nadgradili na već poznatu kvantizaciju varijabli).

[5.2.7] U stvari $\mathcal{G}$ nema netrivijalne linearne (obične) reprezentacije, već samo tzv. projektivne reprezentacije.

Postavlja se pitanje kako se operatori translacija reprezentuju u *talasnoj mehanici*, tj. u prostoru $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$. Ako reprezentant apstraktnog operatora pišemo nepromenjeno, rezultat glasi:

$$\boxed{\hat{U}_\mathbf{a}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{a})}, \ \forall\mathbf{a}. \tag{5.2.16}$$

Naime, $\hat{U}_\mathbf{a}\psi(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\mathbf{r} \mid (\hat{U}_\mathbf{a} \mid \psi\,\rangle) = (\langle\mathbf{r} \mid \hat{U}_\mathbf{a}) \mid \psi\,\rangle = \langle\ \mathbf{r}-\mathbf{a} \mid \psi\rangle = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{a})$ (treba imati u vidu da je $\langle\mathbf{r} \mid \hat{U}_\mathbf{a}$ bra od $\hat{U}_\mathbf{a}^\dagger \mid \mathbf{r}\,\rangle = \hat{U}_\mathbf{a}^{-1} \mid \mathbf{r}\,\rangle = \hat{U}_{-\mathbf{a}} \mid \mathbf{r}\,\rangle = \mid \mathbf{r}-\mathbf{a}\,\rangle$).

Pažljivi čitalac je primetio da je u dokazivanju formule (E15-5.2) jedino bilo važno da je $\langle\mathbf{r} \mid \hat{U}_\mathbf{a}$ bra od $\hat{U}_\mathbf{a}^{-1} \mid \mathbf{r}\,\rangle$. Stoga za sve operatore Galilejeve grupe, ili čak i šire, za sve unitarne operatore $\hat{U}(T)$ važi analogna formula:

$$\boxed{\hat{U}(T)\psi(\mathbf{r}) = \psi(T^{-1}\mathbf{r})}, \ \forall\mathbf{a}. \tag{5.2.17}$$

Ha kraju, da nađemo odgovor i na pitanje kako se operatori translacija prostora iz $\mathcal{H}_o$ reprezentuju u *impulsnoj reprezentaciji*, tj. u prostoru $\mathcal{L}^2(\mathbf{p})$. U analogiji sa rezonovanjem koje dovodi do (5.2.16), dolazi se do zaključka:

$$\hat{U}_\mathbf{a}\psi(\mathbf{p}) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\mathbf{p} \mid \hat{U}_\mathbf{a} \mid \psi\,\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}\langle\ \mathbf{p} \mid \psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}\psi(\mathbf{p}), \tag{5.2.18}$$

tj. dobijamo multiplikativne operatore u vidu faznih faktora (za svaku vrednost argumenta $\mathbf{p}$ drugi fazni faktor!).

5.2.6 * Operatori specijalnih Galilejevih transformacija

Kao što smo videli u (5.2.11), operatori *boost*-ova u orbitnom prostoru $\mathcal{H}_o$ jedne čestice glase:

$$\hat{U}_\mathbf{v} = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{v}\cdot m\hat{\mathbf{r}}}, \ \forall\mathbf{v} \tag{5.2.19}$$

(oni samo formalno deluju u $\mathcal{H}_o$, u stvari ih primenjujemo u Heisenberg-ovoj verziji na operatore u vidu $\hat{U}_\mathbf{v}...\hat{U}_{-\mathbf{v}}$).

Iz (5.1.17*a*)-(5.1.17*b*) sledi sledeće delovanje operatora $\hat{U}_\mathbf{v}$ na osnovni skup opservabli u $\mathcal{H}_o$:

$$\hat{U}_\mathbf{v}\hat{\mathbf{r}}\hat{U}_\mathbf{v}^{-1} = \hat{\mathbf{r}}, \quad \hat{U}_\mathbf{v}\hat{\mathbf{p}}\hat{U}_\mathbf{v}^{-1} = \hat{\mathbf{p}} - m\mathbf{v}, \ \forall\mathbf{v}. \tag{5.2.20}$$

Iz (5.2.19) neposredno sledi (pošto je $\hat{U}_\mathbf{v}$ operatorska funkcija od $\mathbf{r}$):

$$\hat{U}_\mathbf{v} \mid \mathbf{r}\,\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{v}\cdot m\mathbf{r}} \mid \mathbf{r}\,\rangle, \ \forall\mathbf{r}, \ \forall\mathbf{v}. \tag{5.2.21}$$

Na osnovu (5.2.21) odmah možemo da napišemo (imajući u vidu razonovanje kao u odgovarajućem slučaju u prethodnom paragrafu) kako operatori *boost*-ova deluju u koordinatnoj reprezentaciji:

$$\hat{U}_\mathbf{v}\psi(\mathbf{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{v}\cdot m\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}), \ \forall\mathbf{v}. \tag{5.2.22}$$

Dakle, deluju kao multiplikativni operatori.

Da bismo izračunali kako operatori $\hat{U}_\mathbf{v}$ u $\mathcal{H}_o$ deluju na zajedničke svojstvene bazisne vektore kompletne vektorske opservable $\hat{\mathbf{p}}$, polazimo od fazne konvencije ugrađene u definiciju tog bazisa (uporediti (2.9.2*b*)).

$$\hat{U}_\mathbf{v} \mid \mathbf{p}\,\rangle = \hat{U}_\mathbf{v}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \mid \mathbf{p}=0\,\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(-m\mathbf{v}+\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}} \mid \mathbf{p}=0\,\rangle = \mid \mathbf{p}-m\mathbf{v}\,\rangle, \ \forall\mathbf{v}, \ \forall\mathbf{p}. \tag{5.2.23}$$

Kao posledicu od (5.2.23), imamo delovanje operatora specijalnih Galilejevih transformacija u impulsnoj reprezentaciji:

$$\hat{U}_\mathbf{v}\psi(\mathbf{p}) = \psi(\mathbf{p}+m\mathbf{v}), \ \forall\mathbf{v}, \ \forall\mathbf{p}. \tag{5.2.24}$$

5.2.7 Operatori Galilejevih transformacija za višečestični kvantni sistem

Kao što smo videli u § 2.6.8, orbitni prostor stanja N-čestičnog kvantnog sistema je $\mathcal{H}^{(o)}_{1\dots N} = \mathcal{H}^{(o)}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}^{(o)}_N$, tj. on je direktni proizvod orbitnih prostora stanja pojedinih čestica.

Ako se Galilejeva transformacija $T \in \mathcal{G}$ u orbitnom prostoru stanja jedne čestice predstavlja operatorom $\hat{U}(T)$, onda istu transformaciju u $\mathcal{H}^{(o)}_{1\dots N}$ predstavlja operator koji je direktni proizvod

$$\hat{U}_{1\dots N}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}_1(T) \otimes \hat{U}_2(T) \otimes \cdots \otimes \hat{U}_N(T). \tag{5.2.25}$$

(Za značenje direktnog proizvoda operatora videti matematički podsetnik § 2.6.3.)

Od velike je važnosti da se uoči da u (5.2.25) u svim faktor prostorima deluje operator jedne te iste Galilejeve transformacije T, tj. svih N faktor-operatora u (5.2.25) imaju iste Lie-jeve parametre, jer, npr. u pasivnoj interpretaciji, prelaz prelaz na drugi inercijalni sistem istovremeno menja celi objekat.

Zadatak 5.2.1 Pokazati da za prostorne translacije važe sledeće formule u $\mathcal{H}^{(o)}_{1\dots N}$:

$$\hat{U}_{\mathbf{a}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\sum_{n=1}^{N}\hat{\mathbf{p}}_n}; \tag{5.2.26}$$

$$\hat{U}_{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{r}}_n\hat{U}_{\mathbf{a}}^{-1} = \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{a},\ \hat{U}_{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{p}}_n\hat{U}_{\mathbf{a}}^{-1} = \hat{\mathbf{p}}_n,\ n = 1, \dots, N; \tag{5.2.27a,b}$$

$$\hat{U}_{\mathbf{a}} \mid \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \rangle = \mid \mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \dots, \mathbf{r}_N + \mathbf{a} \rangle, \tag{5.2.28a}$$

$$\hat{U}_{\mathbf{a}} \mid \mathbf{p}_1, ..., \mathbf{p}_N \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\sum_{n=1}^{N}\mathbf{p}_n} \mid \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N \rangle; \tag{5.2.28b}$$

a da u koordinatnoj i u impulsnoj reprezentaciji imamo sledeće delovanje:

$$\hat{U}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{a}, \dots, \mathbf{r}_N - \mathbf{a}), \tag{5.2.29a}$$

$$\hat{U}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{p}_1, ..., \mathbf{p}_N) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\sum_{n=1}^{N}\mathbf{p}_n}\psi(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N). \tag{5.2.29b}$$

5.2.8 * Matematički podsetnik — osnovne osobine unitarnih i antiunitarnih operatora

Unitarni operatori u nekom Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}$, pišemo ih u vidu $\hat{U}$, su neprekidni, nesingularni, linearni operatori u $\mathcal{H}$ sa sledećim najvažnijim osobinama:

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\dagger}, \tag{5.2.30}$$

gde "$\dagger$" označava adjungovanje;

$$(\hat{U}\psi, \hat{U}\chi) = (\psi, \chi),\ \forall\psi, \chi \in \mathcal{H}. \tag{5.2.31}$$

Iz (5.2.31) sledi da $\hat{U}$ održava normu svakog vektora. U Dirac-ovoj notaciji (5.2.31) glasi:

$$\langle\psi \mid \hat{U}^{\dagger}\hat{U} \mid \chi\rangle = \langle\ \psi \mid \chi\rangle. \tag{5.2.32}$$

Antiunitarni operatori u $\mathcal{H}$, njih ćemo označavati sa $\hat{U}_a$, su neprekidni, nesingularni, antilinearni operatori u $\mathcal{H}$. Ovo poslednje znači: $\hat{U}_a \sum_{k=1}^K \lambda_k \mid \psi_k \rangle = \sum_{k=1}^K \lambda_k^* \hat{U}_a \mid \psi_k \rangle$, za svaki izbor vektora $\mid \psi_k \rangle \in \mathcal{H}$, kompleksnih brojeva λ_k i celog broja K (zvezdica na λ_k označava kompleksno konjugovanje). Najvažnije osobine antiunitarnih operatora su analogne kao (5.2.30) i (5.2.31):

$$\hat{U}_a^{-1} = \hat{U}_a^\dagger, \tag{5.2.33}$$

$$(\hat{U}_a\psi, \hat{U}_a\chi) = (\psi, \chi)^*, \ \forall \psi, \chi \in \mathcal{H}. \tag{5.2.34}$$

U Dirac-ovoj notaciji (5.2.34) glasi:

$$(\langle \psi \mid \hat{U}_a^\dagger)(\hat{U}_a \mid \chi \rangle) = \langle \psi \mid \chi \rangle^*. \tag{5.2.35}$$

I (5.2.34) povlači da operator održava normu svakog vektora.

Što se tiče pojma adjungovanja operatora, treba se podsetiti da dok je to u slučaju linearnih operatora definisano relacijom

$$(\hat{U}\psi, \chi) = (\psi, \hat{U}^\dagger\chi), \ \forall \psi, \chi \in \mathcal{H}, \tag{5.2.36}$$

u slučaju antilinearnih operatora definicija adjungovanja glasi

$$(\hat{U}_a\psi, \chi) = (\psi, \hat{U}_a^\dagger\chi)^*, \ \forall \psi, \chi \in \mathcal{H}. \tag{5.2.37}$$

5.2.9 * Višekomponentne Lie-jeve grupe i antilinearni operatori simetrije

Da li će se određena transformacija simetrije u $\mathcal{P}(\mathcal{H}_o)$ pretvoriti u unitarni ili u antiunitarni operator u $\mathcal{H}_o$, to u stvari zavisi od fizičke prirode transformacije. Ipak postoji jedan opšti zaključak koji možemo izvesti iz teorije Lie-jevih grupa.

Kaže se da je Lie-jeve grupa *jednokomponentna* ili *povezana* ako se bilo koji element u grupi može prevesti neprekidnim variranjem Lie-jevih parametara u jedinični element u grupi. Osnovne podgrupe Galilejeve grupe T_1, T_3, $\mathrm{R}(3)$ i $\mathrm{T}_3^{(v)}$, kao i cela grupa $\mathcal{G}$, imaju ovu topološku osobinu. Kontraprimer je proširena Galilejeva grupa $\overline{\mathcal{G}}$, koja nastaje spajanjem $\mathcal{G}$ sa grupom inverzija $\{\mathcal{J}_p, \mathcal{J}_v, \mathcal{J}_p\mathcal{J}_v, I\}$. $\overline{\mathcal{G}}$ se sastoji od četiri tzv. topološke komponente[5.2.8,5.2.9]: $\mathcal{G}$, $\mathcal{J}_p\mathcal{G}$, $\mathcal{J}_v\mathcal{G}$ i $\mathcal{J}_p\mathcal{J}_v\mathcal{G}$.

U jednoj topološkoj komponenti svaki element može kontinualno da pređe u svaki drugi, a antilinearni operatori se skokovito razlikuju od linearnih (ne možemo kontinualno prevesti jedan u drugi); stoga, cela komponenta mora da se sastoji ili samo od unitarnih ili samo od antiunitarnin operatora. Pošto jednokomponentna Lie-jeva grupa sadrži identičnu transformaciju I, koja u

[5.2.8] Topološka komponenta je najveći podskup Lie-jeve grupe u kome se bilo koji element može prevesti neprekidnim variranjem Lie-jevih parametara u bilo koji drugi element. Razbijanje grupe na komponente je jedno razbijanje na klase ekvivalencije.

[5.2.9] Da podsetimo, da transformacije iz $\mathcal{G}$ nazivamo kontinualnim transformacijama (uporediti kraj od § 5.1.3), a transformacije iz ostale tri topološke komponente $\mathcal{J}_p\mathcal{G}$, $\mathcal{J}_v\mathcal{G}$ i $\mathcal{J}_p\mathcal{J}_v\mathcal{G}$ u $\overline{\mathcal{G}}$ nazivamo diskretnim. Tu se radi o kontinualnosti (ili diskretnosti) u topološko-grupnom smislu (unutar $\overline{\mathcal{G}}$). Što se tiče neprekidnosti dejstva pojedinih operatora u Hilbert-ovom prostoru, svi operatori iz $\overline{\mathcal{G}}$ su neprekidni, pošto su takvi svi unitarni i antiunitarni operatori.

$\mathcal{H}_o$ očigledno mora biti identični operator $\hat{I}$, svi operatori takve grupe su nužno unitarni. Znači svaki operator koji pripada *Galilejevoj grupi* je sigurno *unitaran*.

Kao što vidimo, samo diskretne transformacije su kandidati da se kvantuju u antiunitarne operatore, ali ni to nije nužno.

5.2.10 * Dodatak — dokaz Baker-Hausdorff-ove leme

Kao što smo rekli u paragrafu § 5.2.3, Lema iz naslova ovog paragrafa tvrdi da važi:

$$e^{\hat{\hat{B}}}\hat{A} = e^{\hat{B}}\hat{A}e^{-\hat{B}}. \tag{5.2.38a}$$

(prepisali smo (5.2.6)) kad god je LS definisana. Eksplicitno LS glasi:

$$e^{\hat{\hat{B}}}\hat{A} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A} + [\,\hat{B}, \hat{A}\,] + \frac{1}{2!}[\,\hat{B}, [\,\hat{B}, \hat{A}\,]\,] + \frac{1}{3!}[\,\hat{B}, [\,\hat{B}, [\,\hat{B}, \hat{A}\,]\,]\,] + \ldots \tag{5.2.38b}$$

Radi dokaza (5.2.38a), pođimo od operatorske funkcije

$$\hat{g}(\hat{A}, \hat{B}, \alpha) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\alpha\hat{B}}\hat{A}e^{-\alpha\hat{B}}, \tag{5.2.39}$$

sa parametrom α, $-\infty < \alpha < \infty$. Lako je videti da

$$\frac{\mathrm{d}\hat{g}}{\mathrm{d}\alpha} = \hat{B}\hat{g} - \hat{g}\hat{B} = [\,\hat{B}, \hat{g}\,], \tag{5.2.40a}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\hat{g}}{\mathrm{d}\alpha^2} = \hat{B}\frac{\mathrm{d}\hat{g}}{\mathrm{d}\alpha} - \frac{\mathrm{d}\hat{g}}{\mathrm{d}\alpha}\hat{B} = [\,\hat{B}, [\,\hat{B}, \hat{g}\,]\,], \tag{5.2.40b}$$

itd.

Razvijajući $\hat{g}$ u Taylor-ov red oko $\alpha = 0$, imajući u vidu da je $\hat{g}(\hat{A}, \hat{B}, \alpha = 0) = \hat{A}$ i koristeći se sa (5.2.40) itd., stižemo do sledećeg reda:

$$\hat{g}(\hat{A}, \hat{B}, \alpha) = \hat{A} + \alpha[\,\hat{B}, \hat{A}\,] + \frac{\alpha^2}{2!}[\,\hat{B}, [\,\hat{B}, \hat{A}\,]\,] + \ldots \tag{5.2.41}$$

Iz (5.2.41) i (5.2.39) odmah sledi (5.2.38a) ako stavimo $\alpha = 1$.

Glava 6

Teorija jednog uglovnog momenta

6.1 Rotacije i uglovni moment u klasičnoj mehanici

Već smo pominjali da su rotacije Galilejeve transformacije sa po tri Lie-jeva parametra, a da na radijus-vektor deluju kao 3×3 realne ortogonalne matrice jedinične determinante. Sve ovo ćemo u odeljku koji je pred nama precizno i detaljno razraditi.

Uvešćemo dve Lie-jeve parametrizacije rotacija: ugao ϕ i ort $\mathbf{u}$ ose rotacije ($\boldsymbol{\phi} = \phi\mathbf{u}$) s jedne strane i Euler-ove (Ojler) uglove kao alternativu.

Videli smo da se rotacije eksponencijalno generišu vektorskom varijablom $\hat{\mathbf{l}}$ uglovnog momenta. Prisnu vezu koja stoga postoji i u klasičnoj fizici između R(3) i $\mathbf{l}$ ilustrovaćemo na primeru centralnog potencijala Kepler-ove čestice.

6.1.1 Osa i ugao rotacije

Intuitivni pojam rotacije u običnom prostoru zasniva se na pojmu ose oko koje se rotira i na pojmu ugla za koji se rotira.

U preciznom određivanju rotacije, polazimo od toga da se zadaje ort ose, obeležavaćemo ga sa $\mathbf{u}$, a zatim se mora zadati ugao, koji ćemo obeležavati sa ϕ. Pri zadavanju ugla moramo se opredeliti za izvesnu konvenciju da bismo se oslobodili neodređenosti.

Uobičajena je konvencija da se ugao definiše po modelu desnog (kod nas uobičajenog) zavrtnja: kažemo da se radi o rotaciji "za ugao ϕ oko orta $\mathbf{u}$" ako, obeleživši proizvoljnu tačku na zavrtnju i posmatrajući projekciju te tačke na ravan normalnu na $\mathbf{u}$, vidimo da ta projekcija opisuje luk čiji je ugao ϕ kada se zavrtanj pomera u smeru $\mathbf{u}$. Ekvivalentno, ovu konvenciju možemo da formulišemo tako da ugao ϕ računamo u smislu obratnom od hoda kazaljke na satu (uobičajeni pozitivni ugao), a da pri tome mi gledamo u ravan u kojoj je ϕ, a ort $\mathbf{u}$ da je uperen u naše lice.

Vektor $\phi\mathbf{u}$ pisaćemo kao $\boldsymbol{\phi}$, a njegove koordinate ϕ_x, ϕ_y i ϕ_z u zadatom Descartes-ovom koordinatnom sistemu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ biće naši Lie-jevi parametri rotacije $R_{\boldsymbol{\phi}}$. Pošto se u kvantnoj mehanici, što se tiče rotacija, opredeljuje za aktivnu interpretaciju, fiksiraćemo koordinatni sistem.

Očigledno nema potrebe da se ugao ϕ definiše van intervala $[0, 2\pi]$, jer tu su već obuhvaćene sve mogućnosti. Ali možemo ovaj interval smanjiti na osnovu sledećeg zapažanja.

Ako rotiramo za ugao $\pi < \phi \leq 2\pi$ oko orta $\mathbf{u}$, postižemo isto kao da smo rotirali za ugao $2\pi - \phi$ oko orta $-\mathbf{u}$. Stoga se možemo ograničiti na interval $[0, \pi]$ što se tiče ugla rotacije.

Sfera koju ispunjavaju vrhovi vektora $\boldsymbol{\phi}$ (kao radijus-vektora) sa svim mogućim ortovima, a sa modulima u intervalu $0 \leq \phi \leq \pi$, nazivaćemo π-loptom. Ova sfera (poluprečnika π) je prostor Lie-jevih parametara za rotacije (opisane vektorom $\boldsymbol{\phi}$).

6.1.2 π-lopta

U prethodnom paragrafu smo zaključili da svaku rotaciju možemo da definišemo vektorom $\boldsymbol{\phi}$ iz π-lopte.

π-lopta ima dve osobenosti. Prvo, nulti vektor $\boldsymbol{\phi} = 0$, koji definiše identičnu transformaciju ili tzv. jediničnu rotaciju, ima proizvoljan ort. Drugo, rotacije definisane vektorima $\pi\mathbf{u}$ i $\pi(-\mathbf{u})$ za bilo koji $\mathbf{u}$ u stvari se podudaraju. Ispostavlja se da se ova dvoznačnost u rotacijama za π ne može jednostavno izbeći. Stoga se dijametralno suprotne tačke na površini π-lopte poistovećuju i to se uključuje u definiciju π-lopte. Dakle, kad govorimo o elementima π-lopte, smatraćemo $\pi\mathbf{u}$ i $\pi(-\mathbf{u})$ istim elementom (za svaki $\mathbf{u}$).

Rotaciji koja odgovara tački $\boldsymbol{\phi} = \phi\mathbf{u}$ π-lopte inverzna je rotaciji koja odgovara tački $-\boldsymbol{\phi} = \phi(-\mathbf{u})$. Elementi sa površine π-lopte (i samo oni, kako ćemo se kasnije uveriti) definišu involutivne rotacije (tj. rotacije koje su same sebi inverzne).

Nije očigledno da uzastopna primena dve proizvoljne rotacije daje opet rotaciju, tj. da rotacije čine grupu (sa uzastopnom primenom kao zakonom množenja u grupi). Videćemo niže da je ipak tako.

6.1.3 Veza između π-lopte i grupe matrica SO(3)

π-lopta nema dovoljno matematičke strukture da se razjasne grupno-teorijska pitanja koja nam se nameću. Sledeća dva teorema, čiji dokaz ćemo dati u Dodacima § 6.1.7 i § 6.1.8, uspostavljaju biunivoko ceo-na-ceo preslikavanje ili korespondenciju između π-lopte i grupe svih 3×3 realnih, ortogonalnih matrica sa jediničnom determinantom. To je tzv. grupa SO(3), ili rečima: specijalna ortogonalna grupa u tri dimenzije.

Obeležimo sa $R(\boldsymbol{\phi})$ matricu iz SO(3) koja korespondira vektoru $\boldsymbol{\phi}$ iz π-lopte, a sa $R_{\boldsymbol{\phi}}$, označimo, kao i malo pre, samu transformaciju u objektivnom prostoru koja odgovara istom elementu π-lopte. Preciznije, neka je objektivni prostor apstraktni trodimenzionalni realni unitarni prostor $\mathcal{V}_3$, a $R_{\boldsymbol{\phi}}$ neka je operator rotacije u njemu. Neka je, dalje, $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ pomenuti proizvoljni ali fiksirani Descartes-ov desni koordinatni sistem u $\mathcal{V}_3$. Koordinate ćemo umesto sa x, y, z indeksirati sa $1, 2, 3$.

Teorem 6.1.1 *Neka je $\boldsymbol{\phi} = \phi\mathbf{u}$ proizvoljni element π-lopte i neka je u bazisu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ reprezentovan koordinatama $\phi_1 = \phi u_1$, $\phi_2 = \phi u_2$, $\phi_3 = \phi u_3$. Sledeća formula mu pridružuje matricu $R(\boldsymbol{\phi}) \in$ SO(3) i to tako da $R(\boldsymbol{\phi})$ reprezentuje rotaciju $R_{\boldsymbol{\phi}}$ (definisanu u § 6.1.1) u pomenutom bazisu:*

$$\cos\phi \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (1-\cos\phi) \begin{pmatrix} u_1^2 & u_1u_2 & u_1u_3 \\ u_1u_2 & u_2^2 & u_2u_3 \\ u_1u_3 & u_2u_3 & u_3^2 \end{pmatrix} + \sin\phi \begin{pmatrix} 0 & -u_3 & u_2 \\ u_3 & 0 & -u_1 \\ -u_2 & u_1 & 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} R(\boldsymbol{\phi}). \qquad (6.1.1)$$

***Napomena* 6.1.1** Lako se vidi da se (6.1.1) može kompaktnije prepisati na sledeći način:

$$R_{mn} = \cos\phi\delta_{mn} + (1-\cos\phi)u_m u_n - \sin\phi \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{mnk} u_k, \qquad (6.1.2)$$

gde je ϵ_{mnk} tzv. *simbol Levi-Civita-e* (čitati: Levi-Čivita), tj. jedinični potpuno antisimetrični tenzor ranga tri. On je nula ako dva indeksa imaju istu vrednost, inače je $+1$ ili -1 prema tome da li je mnk ciklična ili anticiklična permutacija od 123.

Teorem 6.1.2 *Pridruživanje $\boldsymbol{\phi} \to R(\boldsymbol{\phi})$ iz (T 6.1.1) preslikava π-loptu obostrano jednoznačno na* SO(3). *Formulišimo inverzno pridruživanje. Neka je $R \in \mathrm{SO}(3)$ i neka su R_{mn} matrični elementi od R. Vektor $\boldsymbol{\phi} = \phi\mathbf{u}$ iz π-lopte, takav da $R(\boldsymbol{\phi}) = R$, gde je $R(\boldsymbol{\phi})$ dat sa (6.1.1), može se dobiti sledećim algoritmom (koji se sastoji iz tri dela):*

a) Ako je $R_{mn} = \delta_{mn}$, $m, n = 1, 2, 3$, onda je $\phi = 0$ (a $\mathbf{u}$ je arbitrerno).

b) Ako R nije jedinična matrica ali je simetrična, onda je $\phi = \pi$, a komponente orta $\mathbf{u}$ dobijaju se po formulama:

$$u_k^2 = \frac{1}{2}(R_{kk} + 1), \quad k = 1, 2, 3. \qquad (6.1.3a)$$

Obeležimo sa sign(u_k) *predznak*[6.1.1] *od u_k. Neka je k_1 indeks prvog nenultog u_k, $k = 1, 2, 3$, k_2 indeks drugog nenultog u_k ako ga ima, a k_3 indeks trećeg nenultog u_k ako ga ima. Tada je*

$$\mathrm{sign}(u_{k_1}) = 1, \quad \mathrm{sign}(u_{k_2}) = \mathrm{sign}(R_{k_1k_2}), \quad \mathrm{sign}(u_{k_3}) = \mathrm{sign}(R_{k_1k_3}). \qquad (6.1.3b,c,d)$$

c) Ako R nije simetrična matrica, onda

$$\cos\phi = \frac{1}{2}(\mathrm{Tr}\,R - 1) = \frac{1}{2}(R_{11} + R_{22} + R_{33} - 1), \quad 0 < \phi < \pi, \qquad (6.1.4a,b)$$

$$u_1 = \frac{R_{32} - R_{23}}{2\sin\phi}, \quad u_2 = \frac{R_{13} - R_{31}}{2\sin\phi}, \quad u_3 = \frac{R_{21} - R_{12}}{2\sin\phi}. \qquad (6.1.4c,d,e)$$

Zadatak 6.1.1 a) Kako se iz (6.1.1) vidi da je $R(\pi\mathbf{u}) = R(\pi(-\mathbf{u}))$? b) Zašto smo u (6.1.3b) mogli da postuliramo predznak?

Zadatak 6.1.2 Kako se iz (6.1.1) lako vidi da $R(\phi(-\mathbf{u})) = R^{-1}(\phi\mathbf{u})$? (Indikacija: Iskoristiti podatak da je $R(\phi\mathbf{u})$ ortogonalna matrica.)

Na osnovu uspostavljene korespondencije sad je jasno da rotacije čine grupu. Pošto po Teoremu (T 6.1.1) rotacija *reprezentovanjem* u bazisu prelazi u matricu iz SO(3), *uzastopnoj* primeni rotacija odgovara *množenje matrica* (zakon kompozicije u SO(3)).

U stvari iznenađujuća je implikacija da uzastopna primena proizvoljnog broja rotacija može da se zameni jednom jedinom rotacijom.

[6.1.1] Preciznije, $\mathrm{sign}(x) = 0, 1, -1$ za $x = 0$, $x > 0$ i $x < 0$ respektivno.

6.1.4 Konjugacija u grupi rotacija

U svakoj grupi bilo koji element određuje jedno preslikavanje grupe na samu sebe koje održava proizvod u grupi (automorfizam). Reč je o tzv. *konjugaciji u grupi.*

Neka je ψ element π-lopte i R_ψ odgovarajuća rotacija. Neka je R_ϕ tekući element iz R(3). Onda konjugacija elementom R_ψ u R(3) glasi $R_\psi R_\phi R_\psi^{-1}$. Postavlja se pitanje da li konjugacija ne jednostvniji način trnsformiše[6.1.2] vektor ϕ.

Korolar 6.1.1 *Neka su $R_{\phi\mathbf{u}}$ i $R_{\psi\mathbf{v}}$ ($\mathbf{u}$ i $\mathbf{v}$ su ortovi) dve proizvoljne rotacije. Onda važi*

$$R_{\psi\mathbf{v}} R_{\phi\mathbf{u}} R_{\psi\mathbf{v}}^{-1} = R_{\phi(R_{\psi\mathbf{v}}\mathbf{u})} \tag{6.1.5}$$

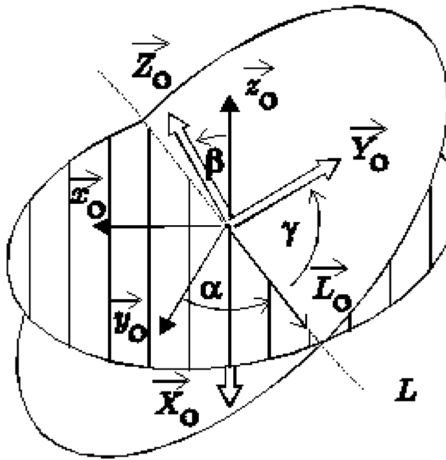
ili ekvivalentno

$$R_{\psi\mathbf{v}} R_{\phi\mathbf{u}} = R_{\phi(R_{\psi\mathbf{v}}\mathbf{u})} R_{\psi\mathbf{v}}. \tag{6.1.6}$$

Dve rotacije komutiraju ako i samo ako im se ose poklapaju (ortovi su isti ili suprotni).

Dokaz ćemo dati u Dodatku § 6.1.9.

6.1.5 Euler-ovi uglovi rotacije



Slika 6.1: **Euler-ovi uglovi:** α, β, γ. $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ *su ortovi prvog koordinatnog sistema,* $\{\mathbf{X}_0, \mathbf{Y}_0, \mathbf{Z}_0\}$ *drugog;* $\mathbf{L}_0$ *je ort linije čvorova.*

Proizvoljna rotacija primenjena na Descartes-ov koordinatni sistem prevodi ga u Descartes-ov koordinatni sistem iste uzajamne orijentacije ortova (tj. oba su desna ili oba leva). Obratno, ako su zadata dva Descartes-ova koordinatna sistema iste uzajamne orijentacije ortova i sa istim koordinatnim početkom, postoji jedna i samo jedna rotacija koja prevodi prvi sistem u drugi. Drugim rečima, ova dva koordinatna sistema tako definišu ili zadaju rotaciju.

Pri ovakvom načinu zadavanja rotacija uvode se tzv. *Euler-ovi uglovi* (videti C 6.1). Ti se uglovi uvode na razne načine u literaturi. Obično je tzv. linija čvorova (L) linija preseka (šatirane) ravni XOY i (nešatirane) ravni xOy. Ostale konvencije variraju. Mi ćemo učiniti sledeće pretpostavke.

Ugao β računa se od orta $\mathbf{z}_0$, njegova veličina je u intervalu $0 \leq \beta \leq \pi$ i s njime je asociran ort čvorne linije $\mathbf{L}_0$. Naime, on je po definiciji usmeren tako da gledajući iz njegovog vrha β raste u smislu suprotnom od hoda kazaljke na satu. Očigledno, $\mathbf{L}_0$ je jednoznačno određen osim ako je $\beta = \pi$, smer od $\mathbf{L}_0$ onda biramo arbitrerno duž linije L (rotacija $R_{\pi\mathbf{L}_0}$ je ipak jednoznačno definisana).

Ugao α računa se od $\mathbf{y}_0$ orta do $\mathbf{L}_0$, $0 \leq \alpha < 2\pi$ opet tako da gledano iz vrha orta $\mathbf{z}_0$ ugao α raste u smislu suprotnom od hoda kazaljke na satu.

[6.1.2] Poželjno je da utvrdimo da sa R_ϕ obeležavamo rotacije u objektivnom (apstraktnom) običnom prostoru, a sa R(3) grupu svih R_ϕ. U koordinatnom sistemu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ rotacije R_ϕ se reprezentuju matricama koje pišemo $R(\phi)$, a grupa svih tih matrica je SO(3).

Ugao γ je definisan tako da ide od $\mathbf{L}_0$ do $\mathbf{Y}_0$, $0 \leq \gamma < 2\pi$, i opet se uzima onaj od dva ugla $\angle(\mathbf{L}_0, \mathbf{Y}_0)$ koji, gledano iz vrha orta $\mathbf{Z}_0$, raste u smislu suprotnom od hoda kazaljke na satu.

Trodimenzionalni interval $0 \leq \alpha < 2\pi$, $0 \leq \beta \leq \pi$, $0 \leq \gamma < 2\pi$ nazivaćemo intervalom definisanosti Euler-ovih uglova.

Na C 6.1 se vidi (ako se npr. prati šta se dešava sa ortom $\mathbf{y}_0$ i $\mathbf{z}_0$) da se desni koordinatni sistem $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ rotira u $\{\mathbf{X}_0, \mathbf{Y}_0, \mathbf{Z}_0\}$ kao rezultat tri uzastopne rotacije:

$$R[\alpha, \beta, \gamma] = R_{\gamma \mathbf{Z}_0} R_{\beta \mathbf{L}_0} R_{\alpha \mathbf{z}_0}. \tag{6.1.7}$$

Faktore u (6.1.7) zamišljamo tako da su definisani elementima iz π-lopte, pri tome ako su α ili γ veći od π, onda po definiciji $R_{\alpha \mathbf{z}_0} = R_{(2\pi-\alpha)(-\mathbf{z}_0)}$, $R_{\gamma \mathbf{Z}_0} = R_{(2\pi-\gamma)(-\mathbf{Z}_0)}$ pri čemu u oznakama na LS-ama nismo napustili konvenciju uzora desnog zavrtnja.

Pošto se sa dva koordinatna sistema $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ i $\{\mathbf{X}_0, \mathbf{Y}_0, \mathbf{Z}_0\}$ može zadati proizvoljna rotacija, $R[\alpha, \beta, \gamma]$ iz (6.1.7) je u stvari proizvoljna rotacija sa Euler-ovim uglovima kao Lie-jevim parametrima.

Teorem 6.1.3 *Proizvoljna rotacija $R[\alpha, \beta, \gamma]$ može se napisati kao proizvod tri rotacije od kojih su prva i treća oko fiksirane z-ose, a druga oko fiksirane y-ose (obe pripadaju prvom koordinatnom sistemu):*

$$R[\alpha, \beta, \gamma] = R_{\alpha \mathbf{z}_0} R_{\beta \mathbf{y}_0} R_{\gamma \mathbf{z}_0}. \tag{6.1.8}$$

Dokaz: Na C 6.1 se vidi da

$$\mathbf{L}_0 = R_{\alpha \mathbf{z}_0} \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{Z}_0 = R_{\beta \mathbf{L}_0} \mathbf{z}_0. \tag{6.1.9a,b}$$

Zamenom (6.1.9*b*) i (6.1.9*a*) u (6.1.7) i korišćenjem (6.1.6) dobijamo

$$R[\alpha, \beta, \gamma] = (R_{\beta \mathbf{L}_0} R_{\gamma \mathbf{z}_0} R^{-1}_{\beta \mathbf{L}_0})(R_{\alpha \mathbf{z}_0} R_{\beta \mathbf{y}_0} R^{-1}_{\alpha \mathbf{z}_0}) R_{\alpha \mathbf{z}_0}. \tag{6.1.10}$$

Ako u (6.1.10) još jedanput zamenimo $R_{\beta \mathbf{L}_0}$ na osnovu (6.1.9*a*) i K 6.1.1, onda dolazimo do izraza

$$R[\alpha, \beta, \gamma] = (R_{\alpha \mathbf{z}_0} R_{\beta \mathbf{y}_0} R^{-1}_{\alpha \mathbf{z}_0}) R_{\gamma \mathbf{z}_0} (R_{\alpha \mathbf{z}_0} R^{-1}_{\beta \mathbf{y}_0} R^{-1}_{\alpha \mathbf{z}_0}) R_{\alpha \mathbf{z}_0} R_{\beta \mathbf{y}_0}. \tag{6.1.11}$$

Uzimajući u obzir da rotacije oko iste ose komutiraju, stižemo najzad do jednakosti (6.1.8). *Q. E. D.*

Teorem 6.1.4 *Operator rotacije $R[\alpha, \beta, \gamma]$ sa Euler-ovim uglovima kao Lie-jevim parametrima reprezentuje se u bazisu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ 3×3 realnom, ortogonalnom matricom $R(\alpha, \beta, \gamma)$ jedinične determinante:*

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma - \sin\alpha\cos\gamma & \cos\alpha\sin\beta \\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\sin\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta \\ -\sin\beta\cos\gamma & \sin\beta\sin\gamma & \cos\beta \end{pmatrix}. \tag{6.1.12}$$

Dokaz: Izraz (6.1.12) se neposredno izračunava iz (6.1.8) imajući u vidu da su matrični reprezententi faktora u (6.1.8) sledeći:

$$R_{\alpha \mathbf{z}_0} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad R_{\beta \mathbf{y}_0} = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix}. \tag{6.1.13a,b}$$

Q. E. D.

Zadatak 6.1.3 Izvesti (6.1.13*a*) iz C 6.1 i pročitati (6.1.13*b*) i $R_{\gamma \mathbf{x}_0}$ iz (6.1.13*a*) imajući u vidu da $\mathbf{x}_0$, $\mathbf{y}_0$ i $\mathbf{z}_0$ igraju simetrične uloge u odnosu na ciklične permutacije.

Zadatak 6.1.4 Izložiti algoritam kojim se može naći osa i ugao za rotaciju zadatu preko Euler-ovih uglova.

6.1.6 * Uglovni moment u Kepler-ovom problemu

Kao što je poznato, u klasičnoj mehanici vremenski izvod uglovnog momenta $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ materijalne tačke može da se napše kao

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{l}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}, \tag{6.1.14}$$

gde je $\mathbf{F}$ sila. Fizička veličina $\mathbf{r} \times \mathbf{F}$ se naziva moment sile.

U Kepler-ovom problemu planetarnog kretanja na materijalnu tačku deluje sila koja je karakteristična za gravitacioni zakon:

$$\mathbf{F} = -\frac{k}{r^2}\frac{\mathbf{r}}{r}. \tag{6.1.15}$$

Ova sila je negativni gradijent potencijala

$$V(r) = -\frac{k}{r}, \tag{6.1.16}$$

koji je centralan, tj. zavisi samo od dužine radijus-vektora, a ne i od njegovog orta.

Iz (6.1.15) i (6.1.14) sledi

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{l}}{\mathrm{d}t} = 0, \tag{6.1.17}$$

tj. imamo tri konstante kretanja: l_x, l_y i l_z.

Zaključak (6.1.17) izveli smo na način koji je prirodan u kontekstu klasične fizike. Ali do sada izloženi formalizam kvantne mehanike ne koristi se pojmovima sile i momenta sile. Zato ćemo promeniti izloženo rezonovanje na način koji je nešto manje uobičajen u klasičnoj mehanici i izvesti (6.1.17) ponovo. Videćemo da se u klasičnoj fizici može rezonovati veoma slično tipičnom rezonovanju u kvantnoj mehanici.

Videli smo u (5.1.19) da proizvoljna rotacija $R_{\boldsymbol{\phi}}$ deluje na varijable $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ na sledeći način: $R_{\boldsymbol{\phi}} A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = A(R(\boldsymbol{\phi})\mathbf{r}, R(\boldsymbol{\phi})\mathbf{p})$. Za varijablu potencijalne energije Kepler-ove čestice (6.1.16) je

$$R_{\boldsymbol{\phi}} V(r) = V(r), \text{ za svako } \boldsymbol{\phi} \text{ iz } \pi\text{-lopte}. \tag{6.1.18}$$

Jednakost (6.1.18) je ekvivalentna definiciji centralnog potencijala.

Potencijal $V(r)$ je, naravno, invarijantan i pod dejstvom infinitezimalnih rotacija. Pišući $R_{\boldsymbol{\phi}} = e^{-\boldsymbol{\phi}\cdot\tilde{\mathbf{l}}}$, po uzoru na (5.1.16), u prvoj aproksimaciji po uglu ϕ imamo $R_{\mathrm{d}\phi\mathbf{u}} = I - \mathrm{d}\phi\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{l}}$ i stoga iz (6.1.18) sledi:

$$V(r) - \mathrm{d}\phi\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{l}} V(r) = V(r).$$

Ova jednakost povlači za sobom $\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{l}} V(r) = 0$, a to, sa svoje strane, zbog proizvoljnosti orta $\mathbf{u}$, može da važi samo ako je ispunjena vektorska jednakost:

$$\tilde{\mathbf{l}} V(r) \stackrel{\text{def}}{=} [\, \mathbf{l}, V(r) \,]_{\mathrm{PZ}} = 0. \tag{6.1.19}$$

Poznato je da je i kinetička energija rotaciono simetrična skalarna varijabla; prema tome, analogno sa (6.1.18), $\tilde{\mathbf{l}}$ deluje i na tu varijablu anulirajuće. Sve skupa

$$\tilde{\mathbf{l}} H \stackrel{\text{def}}{=} [\, \mathbf{l}, H \,]_{\mathrm{PZ}} = 0, \tag{6.1.20}$$

gde je H Hamilton-ova funkcija Kepler-ove čestice.

Uopštenje jednačina (5.1.15) na konzervativnu Kepler-ovu česticu daje sledeću vremensku zavisnost za $\mathbf{l}$:

$$T_{b=t-t_0}\mathbf{l} = e^{-(t-t_0)\tilde{H}}\mathbf{l}, \quad \tilde{H}\mathbf{l} \stackrel{\text{def}}{=} [\,H, \mathbf{l}\,]_{\text{PZ}}. \tag{6.1.21a,b}$$

Pošto je $[\,H, \mathbf{l}\,]_{\text{PZ}} = -[\,\mathbf{l}, H\,]_{\text{PZ}}$, iz (6.1.20) najzad sledi:

$$T_{b=t-t_0}\mathbf{l} = \mathbf{l}, \tag{6.1.22}$$

tj. vremenska evolucija ne menja $\mathbf{l}$.

Naravno, (6.1.22) je ekvivalentna sa (6.1.17). Ali upravo izloženo rezonovanje je prenosivo u kvantnu mehaniku.

Naš je zadatak u sledećim odeljcima da uglovni moment i rotacije zajedno kvantujemo.

6.1.7 * Dodatak 1 — dokaz Teorema 1

a) Ako je $\phi = 0$, (6.1.1) daje $R = I$, što očigledno reprezentuje identičnu transformaciju (i spada u SO(3)).

b) Neka je $\boldsymbol{\phi} = \phi\mathbf{u}$ vektor iz π-lopte, $\phi \neq 0$ i neka je u $\mathcal{V}_3$ fiksiran proizvoljan ortonormirani bazis $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ (desne uzajamne orijentacije ortova), u kojem vektor $\boldsymbol{\phi} = \phi\mathbf{u}$ ima koordinate $(\phi u_1, \phi u_2, \phi u_3)$.

Umesto od pomenutog bazisa, poći ćemo od drugog bazisa $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u}\}$ koji je takođe desni pravougli koordinatni sistem, ali nije u slučajnom odnosu prema našoj rotaciji, već je za nju kanoničan (tj. najprostiji mogući).

U kanoničnom bazisu rotacija $R_{\phi\mathbf{u}}$ je reprezentovana matricom $R_k(\phi\mathbf{u})$, koja glasi:

$$R_k(\phi\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.1.23}$$

(uporediti (6.1.13a)).

Inverznu rotaciju reprezentujemo matricom u kojoj smo ϕ zamenili sa $-\phi$ u (6.1.23). Vidi se da ovo isto tako menja (6.1.23) kao i transponovanje: $R_k^{-1}(\phi\mathbf{u}) = R_k^T(\phi\mathbf{u})$. Dakle, $R_k(\phi\mathbf{u})$ je ortogonalna matrica.

Uvedimo matricu razvoja T pomenutog arbitrernog bazisa po kanoničnom:

$$\mathbf{x}_0 = T_{11}\mathbf{v}_1 + T_{12}\mathbf{v}_2 + T_{13}\mathbf{v}_3 \quad, \mathbf{y}_0 = T_{21}\mathbf{v}_1 + T_{22}\mathbf{v}_2 + T_{23}\mathbf{v}_3 \quad, \mathbf{z}_0 = T_{31}\mathbf{v}_1 + T_{32}\mathbf{v}_2 + T_{33}\mathbf{v}_3. \tag{6.1.24}$$

Kao što je poznato, ortonormirani bazis u ortonormirani bazis prevodi samo ortogonalna matrica, te je T takva.

Neka rotaciju $R_{\phi\mathbf{u}}$ u bazisu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ reprezentuje matrica $R(\phi\mathbf{u})$ (koju izvodimo). Onda

$$R(\phi\mathbf{u}) = TR_k(\phi\mathbf{u})T^{-1}, \tag{6.1.25}$$

pošto je kontragredijentna matrica od T jednaka T: $T^{-1^T} = T$. (U pogledu uloge kontragredijentne matrice eventualno uporediti iznad (Z 5.1.5).)

Lema 6.1.1 *Ako je A realna 3×3 matrica koja je ortogonalna, ili skalarna (tj. broj puta jedinična matrica), ili simetrična, ili kososimetrična, a T je proizvoljna 3×3 realna, ortogonalna matrica, onda je matrica TAT^{-1} takođe ortogonalna, odnosno skalarna, odnosno simetrična, odnosno kososimetrična.*

Dokaz se odmah vidi.

Iz L 6.1.1 sledi da je i $R(\phi\mathbf{u})$ ortogonalna matrica. Obeležavajući determinantu matrice A sa $D(A)$, imamo:

$$D(R(\phi\mathbf{u})) = D(TR_k(\phi\mathbf{u})T^{-1}) = D(T)D(R_k(\phi\mathbf{u}))D(T)^{-1} = \cos^2\phi + \sin^2\phi = 1.$$

Znači, za traženu matricu važi: $R(\phi\mathbf{u}) \in \mathrm{SO}(3)$.

Iz (6.1.23) se vidi da matricu $R_k(\phi\mathbf{u})$ možemo da pišemo kao zbir jedne konstante, jedne simetrične i jedne kososimetrične matrice:

$$R_k(\phi\mathbf{u}) = \cos\phi \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (1-\cos\phi) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \sin\phi \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (6.1.26)$$

Kad se izračuna $R(\phi\mathbf{u}) = TR_k(\phi\mathbf{u})T^{-1}$, dobije se ključna jednakost:

$$\begin{aligned} R_k(\phi\mathbf{u}) &= \cos\phi \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (1-\cos\phi) \begin{pmatrix} T_{13}^2 & T_{13}T_{23} & T_{13}T_{33} \\ T_{23}T_{13} & T_{23}^2 & T_{23}T_{13} \\ T_{33}T_{13} & T_{33}T_{23} & T_{33}^2 \end{pmatrix} \\ &+ \sin\phi \begin{pmatrix} 0 & T_{12}T_{21} - T_{11}T_{22} & T_{12}T_{31} - T_{11}T_{31} \\ T_{22}T_{11} - T_{21}T_{12} & 0 & T_{22}T_{31} - T_{21}T_{31} \\ T_{32}T_{11} - T_{31}T_{12} & T_{32}T_{21} - T_{31}T_{22} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \qquad (6.1.27)$$

S druge strane, sam vektor $\mathbf{v}_3 = \mathbf{u}$ reprezentuje se u bazisu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ brojnom kolonom:

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{13} \\ T_{23} \\ T_{33} \end{pmatrix} \qquad (6.1.28a)$$

(eventualno uporediti napomenu iznad Leme L 6.1.1), tj.

$$T_{k3} = u_k, \quad k = 1, 2, 3. \qquad (6.1.28b)$$

Videli smo u § 6.1.5 da proizvoljna dva koordinatna sistema iste uzajamne orijentacije ortova definišu jednu rotaciju. Rotaciju koja prevodi $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ u $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ u bazisu $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ reprezentuje T, kao što se vidi iz (6.1.24). Već smo dokazali da proizvoljnu rotaciju u proizvoljnom bazisu reprezentuje matrica koja pripada SO(3). Prema tome i $\tilde{T} \in \mathrm{SO}(3)$, tj. $D(\tilde{T}) = D(T) = 1$.

Lema 6.1.2 *Za realnu ortogonalnu 3×3 matricu T jedinične determinante važi:*

$$T_{mn} = \overline{T}_{mn}, \quad \forall m, n, \qquad (6.1.29)$$

gde smo sa $\overline{T}_{mn}$ obeležili algebarski komplement matričnog elementa T_{mn} (tj. sa $(-)^{m+n}$ pomnoženi minor ili subdeterminantu koja preostaje kada u T precrtamo m-tu vrstu i n-tu kolonu).

Dokaz: Za proizvoljnu nesingularnu matricu A, kao što je poznato[6.1.3], važi: $(A^{-1})_{mn} = \frac{1}{\det A}\overline{A}_{mn}$. Pošto je T nesingularna, ortogonalna i jedinične determinante, imamo $(T^{-1})_{mn} = \overline{T}_{mn}$ a s druge strane $(T^{-1})_{mn} = T^T_{mn} = T_{nm}$. Tako odmah sledi (6.1.29). *Q. E. D.*

Na osnovu (6.1.29) možemo izvršiti sledeće zamene radi pojednostavljenja ključne jednakosti (6.1.27):

$$T_{12}T_{21} - T_{11}T_{22} = -T_{33}, \quad T_{12}T_{31} - T_{11}T_{32} = T_{23}, \quad T_{22}T_{31} - T_{21}T_{32} = -T_{13}. \tag{6.1.30}$$

Kada se iskoriste jednakosti (6.1.28b) i (6.1.30) radi zamene u (6.1.27), dobija se (6.1.1).

6.1.8 * Dodatak 2 — dokaz Teorema 2

Lema 6.1.3 *Neka je R proizvoljna matrica iz* SO(3). *Skup vektora $\{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3\}$ koji je definisan tako da ima matricu razvoja R po bazisu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ je bazis sa istom uzajamnom orijentacijom ortova kao u bazisu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$.*

Dokaz: Budući da je R^T, kao i R, ortogonalna (realna) matrica, znamo da je $\{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3\}$ ortonormiran skup vektora (zvaćemo ga drugi bazis). Pođimo sad *ab contrario* (od suprotnog) i pretpostavimo da drugi bazis sadrži ortove suprotne uzajamne orijentacije od ortova prvog. Primenom $\mathcal{J}_p$ na prvi bazis promenićemo mu uzajamnu orijentaciju ortova i onda sigurno postoji neka rotacija $R_{\boldsymbol{\phi}_0}$ koja, delujući posle $\mathcal{J}_p$, prevodi prvi bazis u drugi (uporediti § 6.1.5). U reprezentaciji prvog bazisa transformacija $R_{\boldsymbol{\phi}_0}\mathcal{J}_p$ postaje matrica $R(\boldsymbol{\phi}_0)(-I) = -R(\boldsymbol{\phi}_0)$, čija je determinanta -1 (znamo iz T 6.1.1 da je $R(\boldsymbol{\phi}_0) \in \mathrm{SO}(3)$). Međutim, prema definiciji drugog bazisa dotična matrica $R(\boldsymbol{\phi}_0)(-I)$ je u stvari R, a $\det R = 1$. To je kontradikcija koja dokazuje Lemu L 6.1.3. *Q. E. D.*

Da bismo se uverili da je oblast likova preslikavanja iz T 6.1.1 jednaka SO(3), pođimo opet od proizvoljnog $R \in \mathrm{SO}(3)$ i definišimo drugi bazis $\{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3\}$ kao u Lemi L 6.1.3. Iz paragrafa § 6.1.5 (specijalno formule (6.1.7)) jasno je da jednaka uzajamna orijentactija ortova u bazisima $\{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3\}$ i $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ (kao što sledi iz Leme L 6.1.3) povlači da se drugi bazis dobija iz prvog nekom rotacijom $R_{\phi\mathbf{u}}$, a nju očigledno reprezentuje R. Prema tome, $R(\phi\mathbf{u}) = R$.

Obostrana jednoznačnost preslikavanja iz T 6.1.1 neposredno sledi iz činjenice da je reprezentovanje u bazisu biunivoko.

Pristupimo sad invertovanju pridruživanja iz T 6.1.1.

a) Kao što smo konstatovali pod a) u prethodnom Dodatku, po Teoremu T 6.1.1 vektoru $\boldsymbol{\phi} = 0$ π-lopte pridružujemo $I \in \mathrm{SO}(3)$. Inverzno, matrici I onda pridružujemo $\boldsymbol{\phi} = 0$.

b) Pretpostavimo da je $R \neq I$, ali da je R ipak simetrična matrica iz SO(3). Poći ćemo od $R = R(\boldsymbol{\phi})$ i ispitaćemo kakav treba da je $\boldsymbol{\phi}$.

Razlaganje realne matrice na zbir simetrične i kososimetrične matrice je jednoznačno (kao što je lako videti), a (6.1.1) je već napisano u razloženom vidu. Stoga iz simetričnosti $R = R(\phi\mathbf{u})$ sledi da je treći matrični sabirak u (6.1.1) jednak nuli. Pošto $\mathbf{u} \neq 0$, $\sin\phi = 0$, tj. $\phi = 0$ ili $\phi = \pi$. No, $\phi = 0$ dovodi do $R = I$, kao što smo videli, tako da preostaje samo $\phi = \pi$. Prema tome (6.1.2) ima za posledicu

$$R_{mn} = -\delta_{mn} + 2u_m u_n. \tag{6.1.31}$$

Stavljajući $m = n = k$, dobija se odmah (6.1.3a) za određivanje modula od u_k, $k = 1, 2, 3$.

[6.1.3] Videti, na primer, 13.2-3,4. u priručniku Г. Корн и Т. Корн, *Справочник по математике*, Наука, Москва, 1968.

Pošto u (6.1.31) R_{mn} zavisi kvadratno od koordinata orta $\mathbf{u}$, zajedno sa $\mathbf{u}$ rešenje je i $-\mathbf{u}$ (što je nužno, jer je $\phi = \pi$; uporediti § 6.1.2). Uzećemo samo jedno od ta dva rešenja postulirajući (6.1.3*b*). Onda su (6.1.3*c*) i (6.1.3*d*) očigledne posledice od (6.1.31).

c) Neka je $R \in \mathrm{SO}(3)$ nesimetrična matrica. Opet ćemo poći od $R = R(\phi)$ i tražiti ϕ. Iz (6.1.1) odmah sledi $\mathrm{Tr}\, R(\phi) = 2\cos\phi + 1$, a to daje (6.1.4*a*). Nejednakosti $0 \leq \phi \leq \pi$ su posledica definicije π-lopte. Vrednosti $\phi = 0$ i $\phi = \pi$ su isključene, jer, kao što smo videli pod a) i b), one dovode do $R = I$ odnosno do $R = R^T$, što sad ne dolazi u obzir po pretpostavci. Tako sledi (6.1.4*b*).

Iz (6.1.1) sledi da je treći matrični sabirak u (6.1.1) jednak $\frac{1}{2}(R(\phi\mathbf{u}) - R^T(\phi\mathbf{u}))$. Iz toga možemo zaključiti (uzimajući pogodne matrične elemente dotičnog trećeg sabirka) da važe (6.1.4*c*), (6.1.4*d*), (6.1.4*e*).

6.1.9 * Dodatak 3 — dokaz Korolara 1

Dokazaćemo (6.1.5) u matričnoj reprezentaciji u bazisu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ obeležavajući, radi kratkoće, ortogonalnu matricu koja reprezentuje $R_{\psi\mathbf{v}}$ sa U i koristeći (6.1.1) ili (6.1.2). Sa $R^{(i)}(\phi)$, $i = 1, 2, 3$, obeležićemo tri matrična sabirka na LS-i od (6.1.1).

Izračunaćemo $UR(\phi\mathbf{u})U^{-1}$ sabirak po sabirak. Prvi sabirak $R^{(1)}(\phi)$ u (6.1.1) je konstanta i ona se ne menja.

Drugi sabirak daje

$$(UR^{(2)}(\phi\mathbf{u})U^{-1})_{mn} = (1-\cos\phi)\sum_{kl} U_{mk}u_k u_l U^{-1}_{ln} = (1-\cos\phi)(\sum_k U_{mk}u_k)\sum_l U_{nl}u_l, \quad (6.1.32)$$

pošto je $U^{-1}_{ln} = U_{nl}$.

Treći sabirak je kososimetričan i takav će ostati i posle transformacije sličnosti (L 6.1.1). Znači, dovoljno je izračunati matrične elemente 12, 13 i 23 (npr. dijagonalni elementi su nužno nule).

Neposredno izračunavanje daje ($X = UR^{(3)}(\phi\mathbf{u})U^{-1}$):

$$X_{12} = \sin\phi(u_1(U_{13}U_{22} - U_{12}U_{23}) + u_2(U_{11}U_{23} - U_{13}U_{21}) + u_3(U_{12}U_{21} - U_{11}U_{22})), \quad (6.1.33a)$$
$$X_{13} = \sin\phi(u_1(U_{13}U_{32} - U_{12}U_{33}) + u_2(U_{11}U_{33} - U_{13}U_{31}) + u_3(U_{12}U_{31} - U_{11}U_{32})), \quad (6.1.33b)$$
$$X_{23} = \sin\phi(u_1(U_{23}U_{32} - U_{22}U_{33}) + u_2(U_{21}U_{33} - U_{23}U_{31}) + u_3(U_{22}U_{31} - U_{21}U_{32})). \quad (6.1.33c)$$

Pošto U reprezentuje $R_{\psi\mathbf{v}}$, U je iz SO(3). Onda iz L 6.1.2 sledi $U_{mn} = \overline{U}_{mn}$. Na osnovu ovoga izrazi u malim zagradama u (6.1.33) se pojednostavljuju:

$$(UR^{(3)}(\phi\mathbf{u})U^{-1})_{12} = \sin\phi\,(-u_1U_{31} - u_2U_{32} - u_3U_{33}) = -\sin\phi\sum_k U_{3k}u_k, \quad (6.1.34a)$$
$$(UR^{(3)}(\phi\mathbf{u})U^{-1})_{13} = \sin\phi\,(u_1U_{21} - u_2U_{22} - u_3U_{23}) = \sin\phi\sum_k U_{2k}u_k, \quad (6.1.34b)$$
$$(UR^{(3)}(\phi\mathbf{u})U^{-1})_{23} = \sin\phi\,(-u_1U_{11} - u_2U_{12} - u_3U_{13}) = -\sin\phi\sum_k U_{1k}u_k. \quad (6.1.34c)$$

Definišimo

$$w_m \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{k=1}^{3} U_{mk}u_k, \quad m = 1, 2, 3. \quad (6.1.35)$$

Očigledno, brojna kolona od w_m-ova reprezentuje ort $R_{\psi\mathbf{v}}\mathbf{u}$ u bazisu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$. Formulišimo sad naše rezultate za sva tri sabirka $UR^{(i)}(\phi\mathbf{u})U^{-1}$ pomoću ove brojne kolone:

$$(UR(\phi\mathbf{u})U^{-1})_{mn} = \cos\phi\delta_{mn} + (1-\cos\phi)w_m w_n - \sin\phi\sum_{k=1}^{3}\epsilon_{mnk}w_k \qquad (6.1.36)$$

(iskoristili smo (6.1.32), (6.1.34) i (6.1.35)).

Upoređujući (6.1.36) sa (6.1.2), vidimo da smo dobili

$$(UR(\phi\mathbf{u})U^{-1})_{mn} = (R(\phi R_{\psi\mathbf{v}}\mathbf{u}))_{mn}, \qquad (6.1.37)$$

što je u stvari (6.1.5).

Jednakost (6.1.6) je očigledno ekvivalentna sa (6.1.5).

Poslednji iskaz K 6.1.1 bazira na (6.1.6) i na činjenici da je

$$R_{\psi\mathbf{v}}\mathbf{u} = \mathbf{u} \qquad (6.1.38)$$

ako i samo ako $\mathbf{v} = \pm\mathbf{u}$, kao što se čitalac može lako uveriti.

6.2 Algebra kvantne teorije opšteg uglovnog momenta

Na pojmu orbitnog uglovnog momenta čestice uočićemo osobine koje karakterišu opšti uglovni moment. Potrebu za takvim uopštenim pojmom i za deduktivnim prilazom obrazložićemo ukazujući na pojavu šest uglovnih momenata u kvantnoj mehanici. Zatim ćemo analizirati spektar dve najvažnije opservable u kvantnoj teoriji opšteg uglovnog momenta: kvadrata vektorskog operatora uglovnog momenta i jedne njegove komponente (po konvenciji z-komponente). Proučićemo i odnos ova dva spektra, tj. tzv. kompatibilnost vrednosti kvantnih brojeva.

6.2.1 Komutacione relacije za operatore orbitnog uglovnog momenta

Orbitni uglovni moment kvantno-mehaničke čestice dobija se direktno kvantizacijom klasične varijable $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Prema tome, u orbitnom prostoru stanja čestice $\mathcal{H}_0$ imamo

$$\hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{l}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \qquad (6.2.1\,a,b,c)$$

Zadatak 6.2.1 a) Dokazati da je proizvod dva hermitska operatora hermitski operator ako i samo ako faktori komutiraju. b) Dokazati da je svaka linearna kombinacija hermitskih operatora sa realnim koeficijentima hermitski operator. c) Pokazati da iz a) i b) sledi da je $\mathbf{l}$ trojka hermitskih operatora u Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}_0$.

Zadatak 6.2.2 Pokazati da iz osnovnih komutacionih relacija opservabli koordinata i impulsa slede komutacione relacije za komponente uglovnog momenta

$$[\,\hat{l}_x, \hat{l}_y\,] = \imath\hbar\hat{l}_z \qquad (6.2.2)$$

i analogno za ciklične permutacije indeksa x, y, z.

Kompaktnije, (6.2.2) može da se prepiše u vidu:

$$[\,\hat{l}_q, \hat{l}_{q'}\,] = \imath\hbar \sum_{q''=x,y,z} \epsilon_{qq'q''} \hat{l}_{q''}, \tag{6.2.3}$$

gde q i q' nezavisno mogu biti x, y, z.

Zadatak 6.2.3 Pokazati da iz (6.2.3) sledi

$$\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{l}} = \imath\hbar\hat{\mathbf{l}}. \tag{6.2.4}$$

Zadatak 6.2.4 Pokazati da važe sledeće komutacione relacije:

$$[\,\hat{l}_q, \hat{q}'\,] = \imath\hbar \sum_{q''=x,y,z} \epsilon_{qq'q''} \hat{q}'', \tag{6.2.5}$$

$$[\,\hat{l}_q, \hat{p}_{q'}\,] = \imath\hbar \sum_{q''=x,y,z} \epsilon_{qq'q''} \hat{p}_{q''}. \tag{6.2.6}$$

6.2.2 Značaj komutacionih relacija

Ako pogledamo pobliže komutacione relacije (6.2.2), uočavamo da komponente $\hat{l}_q$ ($q = x, y, z$) orbitnog uglovnog momenta $\hat{\mathbf{l}}$ pomnožene imaginarnom jedinicom, kao što se kaže, zatvaraju Lie-jevu algebru. To u stvari znači da je trodimenzionalni realni prostor koji obrazuju $\imath\hat{l}_x$, $\imath\hat{l}_y$ i $\imath\hat{l}_z$ zatvoren u odnosu na Lie-jev proizvod, koji je jednak komutatoru operatora.

Znači, sa $\imath$ pomnožene komponente uglovnog momenta obrazuju Lie-jevu algebru. Može da se dokaže stav da je ovakva Lie-jeva algebra (tj. kada je Lie-jev proizvod definisan sa (6.2.2)) integrabilna u Lie-jevu grupu[6.2.1] unitarnih operatora. To će reći da se uvođenjem odgovarajućih Lie-jevih parametara, na primer ϕ_x, ϕ_y i ϕ_z iz (6.1.1), i uzimanjem eksponencijalnih funkcija dobija jedna Lie-jeva grupa unitarnih operatora rotacija u Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}_o$.

U stvari mi smo već videli u § 5.1.8 da uglovni moment $\mathbf{l}$ generiše rotacije u klasičnoj fizici. U § 5.2.3 i § 5.2.4 videli smo da se ovaj odnos varijabli i transformacija kvantizacijom prenosi u kvantnu mehaniku i da unitarni operator $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ u $\mathcal{H}_o$, koji je pridružen klasičnoj rotaciji $R_{\phi\mathbf{u}}$ glasi $e^{-\frac{\imath}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{l}}}$.

Važno je istaći u vezi sa gornjim stavom o integrabilnosti algebre u grupu da su komutacione relacije (6.2.2) same za to dovoljne. Fundamentalna paralelnost grupe rotacija s jedne strane (Lie-jeve grupe) i vektorske opservable uglovnog momenta (Lie-jeve algebre) s druge strane, ukazuje na to da komutacione relacije (6.2.2) karakterišu uglovni moment na dubljem planu nego recimo relacije (6.2.5) i (6.2.6).

Kada smo konstruisali orbitni prostor stanja jednodimenzionalne kvantne čestice u § 2.5, pošli smo od komutacione relacije $[\,\hat{x}, \hat{p}_x\,] = \imath\hbar$ (i nekih minornih plauzibilnih pretpostavki). Na osnovu gornje indikacije o značaju relacija (6.2.2) i analogije sa konstrukcijom $\mathcal{H}_x$, mi ćemo kvantnu teoriju opšteg uglovnog momenta zasnovati samo na komutacionim relacijama (6.2.2). Videćemo u ovom odeljku i u odeljcima § 6.3 i § 6.4 kako će iz ove, na prvi pogled veoma skromne, postavke izrasti jedna moćna teorija, koja je od velikog značaja u kvantnoj mehanici.

[6.2.1] Za detaljno proučavanje Lie-jevih algebri i grupa (kao i dokaz pomenutog stava) može da posluži izvrsna knjiga: Л.С. Понтрягин, *Непрерывные группы*, Гос. Изд. Техн. Теор. Лит., Москва, 1954.

6.2.3 Motivacija za uvođenje pojma opšteg uglovnog momenta

U klasičnoj fizici, pored uglovnog momenta jedne materijalne tačke $\mathbf{l}$, postoji i ukupni uglovni moment sistema od N materijalnih tačaka: $\mathbf{L} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=1}^{N} \mathbf{l}_n$. Neke kvantne čestice, međutim, imaju i stepen slobode unutrašnjeg rotacionog kretanja (tzv. spin), kao što ćemo videti u odeljku § 6.9. Zahvaljujući toj činjenici, u kvantnoj mehanici se umesto 2 pojavljuje 6 uglovnih momenata: orbitni uglovni moment[6.2.2] jedne čestice $\hat{\mathbf{l}}$; ukupni orbitni uglovni moment sistema čestica $\hat{\mathbf{L}}$; spinski uglovni moment jedne čestice $\hat{\mathbf{s}}$; ukupni spin sistema čestica $\hat{\mathbf{S}}$; ukupni uglovni moment jedne čestice $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$; i, najzad, ukupni uglovni moment sistema čestica $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$.

Pojavljuje se i šest vrsta rotacija, ali samo jedna od njih ima neposrednog fizičkog smisla. To su, naravno, rotacije koje odgovaraju $\hat{\mathbf{J}}$. (U slučaju jedne čestice, $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{j}}$.)

Očigledno je veoma celishodno da se opredelimo za deduktivni prilaz i da uvedemo pojam opšteg uglovnog momenta, koji će da obuhvati svih šest pomenutih slučajeva zadržavajući njihove zajedničke osobine. Obeležavaćemo ga sa $\hat{\mathbf{K}}$.

Na osnovu argumentacije kojom smo završili prethodni paragraf, jasno je da za $\hat{\mathbf{K}}$ treba definisati analogon komutacionih relacija (6.2.2) ili (6.2.3):

$$[\,\hat{K}_q, \hat{K}_{q'}\,] = \imath\hbar \sum_{q''=x,y,z} \epsilon_{qq'q''} \hat{K}_{q''}, \quad q, q' = x, y, z, \tag{6.2.7}$$

a o Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}$ u kome $\hat{\mathbf{K}}$ deluje ne treba ništa specijalno pretpostaviti.

S druge strane, komutacione relacije (6.2.5) i (6.2.6) izražavaju odnos dotičnog uglovnog momenta prema osnovnom skupu opservabli $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$, tj. one definišu jednočestični orbitni uglovni moment kao specijalni slučaj: $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{l}}$ i $\mathcal{H} = \mathcal{H}_o$.

Pored pomenutih 6 realizacija za opšti uglovni moment $\hat{\mathbf{K}}$ postoje još dva analogona od $\hat{\mathbf{K}}$: izospinski uglovni moment (ili kratko izospin) jedne čestice $\hat{\mathbf{t}}$ i izospin sistema čestica $\hat{\mathbf{T}}$. Njih ćemo detaljno razrađivati u glavi 8.

6.2.4 Kako naći kompatibilne opservable

Opšti uglovni moment definišemo komutacionim relacijama (6.2.7) ili eksplicitno sa:

$$\boxed{[\,\hat{K}_x, \hat{K}_y\,] = \imath\hbar\hat{K}_z, \quad [\,\hat{K}_y, \hat{K}_z\,] = \imath\hbar\hat{K}_x, \quad [\,\hat{K}_z, \hat{K}_x\,] = \imath\hbar\hat{K}_y}. \tag{6.2.8a,b,c}$$

Videli smo u § 6.1.6 da je u Kepler-ovom problemu u klasičnoj fizici uglovni moment vektorski integral kretanja. Pitamo se da li je nešto slično moguće u kvantnoj mehanici.

Radi odgovora moramo se podsetiti da se u kvantnoj mehanici traže kompatibilne opservable, koje je moguće istovremeno meriti i koje su predstavljene komutirajućim hermitskim operatorima. Po mogućnosti nastoji se da se izgradi potpuni skup kompatibilnih opservabli koje će svojom zajedničkom svojstvenom dekompozicijom razbiti Hilbert-ov prostor $\mathcal{H}$ u same pravce (videti § 2.4.2 i § 2.4.3).

[6.2.2] Pridev "orbitni" se u kvantnoj mehanici baš i pojavljuje radi razlikovanja od "spinskog" uglovnog momenta (ili rotacionog kretanja koje mu odgovara).

Iz relacija (6.2.8) je očigledno da nijedna opservabla uglovnog momenta $\hat{K}_q$, $q = x, y, z$, nije kompatibilna ni sa jednom drugom od njih. Tako na primer, kao što odmah sledi iz (6.2.8a) i relacija neodređenosti (4.1.3), imamo nejednakost

$$\Delta \hat{K}_x \Delta \hat{K}_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \, \hat{K}_z \, \rangle| \qquad (6.2.9)$$

u bilo kom stanju $|\, \psi \,\rangle \in \mathcal{H}$.

Zadatak 6.2.5 Pokazati da se $\hat{K}_x$ i $\hat{K}_y$ mogu izmeriti istovremeno sa potpunom preciznošću (tj. sa nultim neodređenostima $\Delta \hat{K}_x = \Delta \hat{K}_y = 0$) ako i samo ako je fizički sistem u stanju $|\, \psi \,\rangle$ koje zadovoljava $\hat{\mathbf{K}} \,|\, \psi \,\rangle = 0$.

Zadatak 6.2.6 Pokazati da kvadrat uglovnog momenta

$$\hat{\mathbf{K}}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_x^2 + \hat{K}_y^2 + \hat{K}_z^2, \qquad (6.2.10)$$

komutira sa svakom komponentom uglovnog momenta

$$\boxed{[\, \hat{\mathbf{K}}^2, \hat{K}_q \,] = 0, \quad q = x, y, z}, \qquad (6.2.11a)$$

ili, skraćeno napisano

$$[\, \hat{\mathbf{K}}^2, \hat{K}_q \,] = 0. \qquad (6.2.11b)$$

Na osnovu (6.2.11a) uzimaju se $\hat{\mathbf{K}}^2$ i (po konvenciji baš) $\hat{K}_z$ kao *dve osnovne kompatibilne opservable*.

6.2.5 Jedna nejednakost za očekivane vrednosti

Pre nego što pristupimo sistematskom proučavanju zajedničkog svojstvenog problema od $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$, napravićemo malu devijaciju da dokažemo jednu nejednakost koja će nam pomoći da shvatimo koliko se kvantna teorija uglovnog momenta razlikuje od odgovarajuće teorije u klasičnoj fizici.

Lema 6.2.1 *a) U proizvoljnom stanju $|\, \psi \,\rangle \in \mathcal{H}$ važi nejednakost za očekivane vrednosti*

$$\langle \, \hat{\mathbf{K}}^2 \, \rangle \geq \langle \, \hat{K}_q^2 \, \rangle, \; q = x, y, z. \qquad (6.2.12)$$

b) Za bilo koje $q = x, y, z$ jednakost važi ako i samo ako su zadovoljene istovremeno sledeće tri svojstvene jednačine

$$\hat{\mathbf{K}} \,|\, \psi \,\rangle = 0. \qquad (6.2.13)$$

Dokaz: a) Treba prvo uočiti da je svaki sabirak u (6.2.10) pozitivan (po starijoj terminologiji: pozitivno semidefinitan) operator, tj. operator čija je očekivana vrednost u svakom stanju nenegativna. Naime,

$$\langle \chi \,|\, \hat{K}_x^2 \,|\, \chi \rangle = (\langle \chi \,|\, \hat{K}_x)(\hat{K}_x \,|\, \chi \rangle) = ||\hat{K}_x \,|\, x \rangle||^2 \geq 0, \quad \forall \,|\, \chi \,\rangle \in \mathcal{H}.$$

Iz toga sledi (6.2.12) (sa skraćenom notacijom, npr. $\langle \, \hat{\mathbf{K}}^2 \, \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi \,|\, \hat{\mathbf{K}}^2 \,|\, \psi \,\rangle$).
b) Treba zapaziti da kada sve tri komponente $\hat{K}_q$ anuliraju $|\, \psi \,\rangle$, to nije u protivurečnosti sa komutacionim relacijama (6.2.8a)-(6.2.8c) i to je očigledno dovoljan uslov za $\langle \, \hat{\mathbf{K}}^2 \, \rangle = \langle \, \hat{K}_q^2 \, \rangle$ $(q = x, y, z)$. Potrebnost se vidi sledećim rezonovanjem. Ako uzmemo očekivanu vrednost u stanju $|\, \psi \,\rangle$ svih članova jednakosti (6.2.10) i ako pretpostavimo da važi npr. $\langle \, \hat{\mathbf{K}}^2 \, \rangle = \langle \, \hat{K}_z^2 \, \rangle$, onda sledi $\langle \, \hat{K}_x^2 \, \rangle = \langle \, \hat{K}_y^2 \, \rangle = 0$ (jer su oba *a priori* nenegativna).

Opet zbog $\langle \hat{K}_x^2 \rangle = \|\hat{K}_x \mid \psi \rangle\|^2$ itd., i zbog pozitivne definitnosti skalarnog proizvoda u $\mathcal{H}$ (tj. samo nulti vektor ima normu nula), sledi $\hat{K}_x \mid \psi \rangle = \hat{K}_y \mid \psi \rangle = 0$, a preko (6.2.8*a*) i $\hat{K}_z \mid \psi \rangle = 0$, što je sve skupa (6.2.13). *Q. E. D.*

Klasično imamo $\mathbf{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$, a varijable l_q^2 $(q = x, y, z)$ su nenegativne. I klasično je uvek $\overline{\mathbf{l}^2} \geq \overline{l_q^2}$, $\forall q$ i stoga (6.2.12) uopšte ne iznenađuje. Međutim, klasično uvek postižemo jednakost u ovoj nejednakosti kada q-tu osu orijentišemo duž pravca $\mathbf{l}$. Iskaz b) Leme L 6.2.1 nam otkriva da je to u kvantnom slučaju moguće samo za trivijalni slučaj nultog uglovnog momenta. Inače nije, tj. inače uvek važi $\langle \hat{\mathbf{K}}^2 \rangle \geq \langle \hat{K}_q^2 \rangle$. Dakle, za nenulti uglovni moment (ovaj pojam će kasnije biti preciznije definisan), osa se nikad ne može postaviti duž vektora $\hat{\mathbf{K}}$. To je svakako posledica osnovne činjenice da $\hat{K}_q$ $(q = x, y, z)$ uzajamno nisu kompatibilni (za razliku od $\hat{p}_q$, $q = x, y, z$, na primer), prema tome vektor $\hat{\mathbf{k}}$ ne definiše osu.

6.2.6 Pomoćni operatori podizanja i spuštanja

Mada $\hat{\mathbf{K}}$ nisu osnovni skup opservabli, sličnost sa našim proučavanjem $\hat{x}, \hat{p}_x$ u $\mathcal{H}_x$ (u § 2.5) je dosta velika. Tamo smo uveli pomoćne operatore pomeranja $e^{-\frac{i}{\hbar} x \hat{p}_x}$, $-\infty < x < \infty$ (oni su vršili "pomeranja" po svojstvenom bazisu od $\hat{x}$).

U kvantnoj teoriji uglovnog momenta kao analogoni pomeranja uvode se nehermitski (i neunitarni) operatori:

$$\hat{K}_+ \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_x + i\hat{K}_y, \quad \hat{K}_- \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_x - i\hat{K}_y \tag{6.2.14a,b}$$

tzv. *operator podizanja*, odnosno *operator snižavanja* (videćemo niže šta opravdava ove nazive).

Zadatak 6.2.7 a) Dokazati sledeće komutacione relacije:

$$[\, \hat{K}_+, \hat{K}_- \,] = 2\hbar \hat{K}_z, \tag{6.2.15}$$

$$[\, \hat{K}_z, \hat{K}_+ \,] = \hbar \hat{K}_+, \quad [\, \hat{K}_z, \hat{K}_- \,] = -\hbar \hat{K}_-, \tag{6.2.16a,b}$$

$$[\, \hat{\mathbf{K}}^2, \hat{K}_+ \,] = 0, \quad [\, \hat{\mathbf{K}}^2, \hat{K}_- \,] = 0. \tag{6.2.17a,b}$$

b) Dokazati sledeće funkcionalne zavisnosti

$$\hat{\mathbf{K}}^2 = \frac{1}{2}(\hat{K}_+\hat{K}_- + \hat{K}_-\hat{K}_+) + \hat{K}_z^2, \tag{6.2.18}$$

$$\hat{K}_-\hat{K}_+ = \hat{\mathbf{K}}^2 - \hat{K}_z(\hat{K}_z + \hbar), \tag{6.2.19}$$

$$\hat{K}_+\hat{K}_- = \hat{\mathbf{K}}^2 - \hat{K}_z(\hat{K}_z - \hbar). \tag{6.2.20}$$

6.2.7 Postavljanje zadatka istovremene analize dva spektra

Kao što smo rekli, $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$ su kompatibilne opservable, ali u opštem slučaju ne čine kompletan skup. U konkretnim primenama ove teorije mi ćemo ih dopuniti do potpunog skupa kompatibilnih opservabli i tada ćemo izgraditi zajednički svojstveni bazis celog pomenutog skupa operatora. Pre nego što ćemo proučiti svojstvene vrednosti od $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$ kojima odgovaraju zajednički svojstveni vektori ovih operatora, da postavimo naš zadatak dovoljno precizno.

Pretpostavljamo da $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$ imaju prave zajedničke svojstvene vektore. Pisaćemo[6.2.3] ih kao $\mid km\,\rangle$, a odgovarajuće istovremene svojstvene jednakosti u vidu:

$$\boxed{\hat{\mathbf{K}}^2 \mid km\,\rangle = k(k+1)\hbar^2 \mid km\,\rangle, \quad k \geq 0, \quad \hat{K}_z \mid km\,\rangle = m\hbar \mid km\,\rangle}. \tag{6.2.21a,b,c}$$

Veličine $\hbar^2$ i $\hbar$ su jedinice za $\hat{\mathbf{K}}^2$ odnosno $\hat{K}_z$, a merni broj svojstvene vrednosti od $\hat{\mathbf{K}}^2$ pišemo u obliku $k(k+1)$, jer, kao što ćemo videti u Teoremu T 6.2.1 niže, k uzima jednostavnije vrednosti nego što su same svojstvene vrednosti od $\hat{\mathbf{K}}^2$.

Zadatak 6.2.8 Pokazati da svakom $y \geq 0$ obostrano jednoznačno odgovara $k \geq 0$ po formuli $y = k(k+1)$ i da je $y = 0$ ako i samo ako je $k = 0$.

Pošto je $\hat{\mathbf{K}}^2$ pozitivan operator, svaka njegova svojstvena vrednost je nenegativna. Iskaz u Zadatku Z 6.2.8 onda opravdava ograničenje u nejednakosti (6.2.21b).

6.2.8 Pomoćne formule

Formulišimo i dokažimo prve rezultate.

Lema 6.2.2 *Neka je $\mid km\,\rangle$ normiran vektor u $\mathcal{H}$ koji zadovoljava (6.2.21).*

a) Onda je

$$\boxed{-k \leq m \leq k}. \tag{6.2.22}$$

b) Ako je uz to još $m = k$, onda je

$$\hat{K}_+ \mid km\,\rangle = 0, \tag{6.2.23}$$

a ako $m < k$, onda je $\hat{K}_+ \mid km\,\rangle$ takođe zajednički svojstveni vektor od $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$ i

$$\hat{\mathbf{K}}^2(\hat{K}_+ \mid km\rangle) = k(k+1)\hbar^2(\hat{K}_+ \mid km\rangle),\ \hat{K}_z(\hat{K}_+ \mid km\rangle) = (m+1)\hbar(\hat{K}_+ \mid km\rangle), \tag{6.2.24a,b}$$

$$\|\hat{K}_+ \mid km\,\rangle\| = \hbar\sqrt{k(k+1) - m(m+1)}. \tag{6.2.24c}$$

c) Iz $m = -k$ sledi

$$\hat{K}_- \mid km\,\rangle = 0, \tag{6.2.25}$$

a ako je $m > -k$, onda važi

$$\hat{\mathbf{K}}^2(\hat{K}_- \mid km\,\rangle) = k(k+1)\hbar^2(\hat{K}_- \mid km\,\rangle), \quad \hat{K}_z(\hat{K}_- \mid km\,\rangle) = (m-1)\hbar(\hat{K}_- \mid km\,\rangle), \tag{6.2.26a,b}$$

$$\|\hat{K}_- \mid km\,\rangle\| = \hbar\sqrt{k(k+1) - m(m-1)}. \tag{6.2.26c}$$

[6.2.3] U stvari $\mid km\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \mid km\lambda\rangle$, tj. λ je ovde ispušteno radi jednostavnosti; koristićemo se njime u sledećem odeljku. Naime, pošto u opštem slučaju $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$ nisu potpun skup kompatibilnih opservabli, oni sami ne definišu bazis u $\mathcal{H}$. Za sada neodređeno λ pokazuje koje svojstvene vrednosti ostalih opservabli u potpunom skupu odgovaraju zajedničkom svojstvenom vektoru $\mid km\,\rangle$.

Dokaz: Relacije (6.2.19)-(6.2.21) imaju za posledicu

$$\hat{K}_-\hat{K}_+ \mid km\,\rangle = [k(k+1) - m(m+1)]\hbar^2 \mid km\,\rangle, \quad \hat{K}_+\hat{K}_- \mid km\,\rangle = [k(k+1) - m(m-1)]\hbar^2 \mid km\,\rangle. \quad (6.2.27a,b)$$

Prema tome,

$$||\hat{K}_+ \mid km\,\rangle||^2 = \langle km \mid \hat{K}_-\hat{K}_+ \mid km\,\rangle = (k(k+1) - m(m+1))\hbar^2, \quad (6.2.28a)$$

$$||\hat{K}_- \mid km\,\rangle||^2 = \langle km \mid \hat{K}_+\hat{K}_- \mid km\,\rangle = (k(k+1) - m(m-1))\hbar^2. \quad (6.2.28b)$$

Obratiti pažnju da je[6.2.4] npr. $\langle km \mid \hat{K}_-\hat{K}_+ \mid km\,\rangle = (\langle km \mid \hat{K}_-)(\hat{K}_+ \mid km\,\rangle)$, a $\langle km \mid \hat{K}_-$ je bra od $\hat{K}_+ \mid km\,\rangle$. Pošto $\mathcal{H}$ ima pozitivno definitnu metriku, svi vektori u njemu imaju nenegativnu normu. Imajući to u vidu, iz (6.2.28a), (6.2.28b) zaključujemo da važe nejednakosti

$$k(k+1) - m(m+1) \geq 0, \quad k(k+1) - m(m-1) \geq 0. \quad (6.2.29a,b)$$

Lako je videti da od ove dve nejednakosti (6.2.29a) daje jače ograničenje na pozitivne vrednosti m, a (6.2.29b) daje jače za negativne vrednosti. Oba ova ograničenja mogu da se napišu u vidu $k \geq |m|$ (i obratno, iz ove nejednakosti sledi (6.2.29)). Time smo dokazali (6.2.22). Iz (6.2.28a) je očigledno da $m = k$ ima za posledicu $\hat{K}_+ \mid km\,\rangle = 0$, što dokazuje (6.2.23), dok (6.2.24a) odmah sledi iz komutiranja $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_+$ (videti (6.2.17a)) i (6.2.21a)-(6.2.21b). Dalje, (6.2.16a) možemo da prepišemo u vidu $\hat{K}_z\hat{K}_+ = \hat{K}_+(\hat{K}_z + \hbar)$, tako da LS od (6.2.24$b$) i (6.2.21$c$) odmah daje DS-u od (6.2.24b). Jednakost (6.2.24c) je neposredna posledica (6.2.28a), a (6.2.25) se dobija ako (6.2.28b) prepišemo u vidu $||\hat{K}_- \mid km\,\rangle||^2 = \langle km \mid \hat{K}_+\hat{K}_- \mid km\,\rangle = (k(k+1) - (-m)((-m)+1))\hbar^2$. Dalje, (6.2.26$a$) sledi iz komutiranja (6.2.17b), dok je (6.2.26b) posledica relacije (6.2.16b) koja ekvivalentno glasi: $\hat{K}_z\hat{K}_- = \hat{K}_-(\hat{K}_z - \hbar)$; najzad (6.2.26$c$) je direktna konsekvenca jednakosti (6.2.28b). *Q. E. D.*

Čitaocu je bez sumnje jasno da relacije (6.2.24b) i (6.2.26b) opravdavaju nazive "operator podizanja" za $\hat{K}_+$, odnosno "operator spuštanja" za $\hat{K}_-$.

U kvantnoj mehanici je uobičajeno da se *kvantnim brojevima* nazivaju bilo same svojstvene vrednosti opservable, bilo drugi neki realni brojevi koji na obostrano jednoznačan način korespondiraju svojstvenim vrednostima (a prostiji su po svojoj prirodi). U kontekstu svojstvenih jednakosti (6.2.21) broj k se naziva *kvantni broj uglovnog momenta* $\hat{\mathbf{K}}$ (misli se u stvari na $\hat{\mathbf{K}}^2$), a m se naziva *magnetni kvantni broj* (razlog za ovaj termin videćemo u opisu Zeeman-ovog efekta u § 6.8).

6.2.9 Svojstvene vrednosti i njihov odnos

Sada imamo dovoljno pomoćnih rezultata da smo u stanju da dokažemo glavni rezultat ovog odeljka.

Teorem 6.2.1 *a) Svojstvene vrednosti (iz diskretnog spektra) opservable* $\hat{\mathbf{K}}^2$ *mogu da se pišu u vidu* $k(k+1)\hbar^2$*, a kvantni broj* k *može da bude ceo ili poluceo, tj. jednakj sa nekim brojem iz skupa*

$$\boxed{k = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \tfrac{5}{2}, 3, ...} \quad (6.2.30)$$

("polucelo" ovde skraćeno znači: polovina neparnog celog).

[6.2.4] Možda treba da se podsetimo da je operator koji u matričnom elementu deluje nalevo (tj. na bra) ekvivalentan (po dualizmu ket-bra) adjungovanom. Pošto su hermitski operatori samoadjungovani, nalevo deluje ekvivalentni istom operatoru. Međutim, na primer $\hat{K}_+$ je nehermitski operator, te nalevo deluje kao ekvivalentni njegovom adjungovanom, a prema (6.2.14) je $\hat{K}_+^\dagger = \hat{K}_-$.

b) Magnetni kvantni broj m može da ima samo celu ili polucelu vrednost, tj.

$$m = 0, \pm\frac{1}{2}, \pm 1, \pm\frac{3}{2}, \pm 2, \pm\frac{5}{2}, \pm 3, ... \tag{6.2.31}$$

c) Ako je $|\, km\,\rangle$ *normiran vektor koji zadovoljava (6.2.21), magnetni kvantni broj m mora da ima jednu od sledećih vrednosti:*

$$\boxed{m = -k, -k+1, -k+2, ..., k-1, k}. \tag{6.2.32}$$

Dokaz: Pretpostavimo opet da je $|\, km\,\rangle$ normiran vektor u $\mathcal{H}$ koji zadovoljava (6.2.21). Formirajmo niz

$$\hat{K}_+ \,|\, km\,\rangle, \hat{K}_+^2 \,|\, km\,\rangle, ..., \hat{K}_+^p \,|\, km\,\rangle, \tag{6.2.33}$$

gde je p prirodan broj. Pretpostavimo prvo (koristimo se tzv. *ad absurdum* — ka apsurdnom — rezonovanjem) da nijedan vektor u (6.2.33) nije nula, ma koliko veliki da je broj p. Onda su to, na osnovu (6.2.24b), sve svojstveni vektori od $\hat{K}_z$ sa odgovarajućim svojstvenim vrednostima:

$$(m+1)\hbar, (m+2)\hbar, ..., (m+p)\hbar. \tag{6.2.34}$$

Pošto je k fiksirano (izborom vektora $|\, km\rangle$), a p je proizvoljno veliko, možemo postići $m+p \geq k$ u kontradikciji sa (6.2.22). Prema tome, ako je p dovoljno veliko, počev od nekog vektora svi članovi niza (6.2.33) moraju biti nule. Fiksirajmo p tako da su svi vektori u (6.2.33) nenulti, a već sledeći da je nula, tj. $\hat{K}_+^{p+1} \,|\, km\,\rangle = 0$. Očigledno je iz Leme L 6.2.2 i (6.2.33) da je onda nužno

$$m + p = k. \tag{6.2.35a}$$

Operator $\hat{K}_-$ ima osobine koje su potpuno simetrične osobinama $\hat{K}_+$ (iskazi Leme L 6.2.2 su simetrični u pogledu ta dva operatora), te potpuno analognim rezonovanjem niz $\hat{K}_- \,|\, km\,\rangle, \hat{K}_-^2 \,|\, km\,\rangle, ..., \hat{K}_-^q \,|\, km\,\rangle$ sa odgovarajućim svojstvenim vrednostima $(m-1)\hbar, ..., (m-q)\hbar$ operatora $\hat{K}_z$ dovodi do

$$m - q = -k. \tag{6.2.35b}$$

Oduzimajući (6.2.35b) od (6.2.35a), dobijamo

$$p + q = 2k. \tag{6.2.36}$$

Pošto su p i q celi brojevi, $2k$ mora biti ceo broj. Time je dokazano tvrđenje a), tj. (6.2.30). Pošto je p ceo broj, iz (6.2.35a) se vidi da je m iste celobrojnosti kao k, tj. ako je k ceo broj, onda je i m ceo broj, ako je k poluceo, onda je i m poluceo (ali ne mora biti nenegativan). Imajući u vidu već dokazanu relaciju (6.2.30), u stvari smo dokazali iskaz b) Teorema, tj. (6.2.31). Iz činjenice da je m iste celobrojnosti kao k i iz (6.2.22) odmah sledi (6.2.32), tj. iskaz c). *Q. E. D.*

6.2.10 Kritički komentar

Prodiskutujmo ograničenja iz Teorema T 6.2.1, tj. šta nismo dokazali. Teorem T 6.2.1 daje samo potrebne uslove, drugim rečima, on samo zabranjuje da k ima neku drugu vrednost od onih koje su nabrojane u (6.2.30), da m ima drugu vrednost od nabrojanih u (6.2.31) i da kvantni brojevi k i m koji se susretnu u zajedničkom svojstvenom vektoru $|\, km\rangle$ budu u ikakvom drugom odnosu nego što je taj koji je dat u (6.2.32). Teorem T 6.2.1 ne daje nijedan dovoljan uslov, ne tvrdi ništa pozitivno (tj. ništa što nije poricanje).

Mi i dalje ne znamo koje svojstvene vrednosti jedan konkretan zadati $\hat{\mathbf{K}}^2$ ima u $\mathcal{H}$ i analogno za $\hat{K}_z$. Za davanje odgovora na ova pitanja teorija opšteg uglovnog momenta je nemoćna. Za to je potrebno iskoristiti znanje o konkretnoj prirodi vektorske opservable $\hat{\mathbf{K}}$.

Međutim, jedan pozitivan iskaz se ipak može tvrditi na osnovu naših rezultata i njime ćemo dopuniti Teorem T 6.2.1 u sledećem paragrafu.

6.2.11 Multiplet zajedničkih svojstvenih vektora

Teorem 6.2.2 *Ako u $\mathcal{H}$ postoji normiran zajednički svojstveni vektor $\mid km \rangle$ koji zadovoljava (6.2.21), onda u $\mathcal{H}$ nužno postoji $2k+1$ zajedničkih svojstvenih vektora, ceo tzv.* multiplet

$$\mid k, m=-k \rangle, \mid k, m=-k+1 \rangle, ..., \mid k, m=k-1 \rangle, \mid k, m=k \rangle \tag{6.2.37}$$

dozvoljen izrazom (6.2.32).

Dokaz: Iz (6.2.33) i (6.2.24) i analognih relacija sa stepenima od $\hat{K}_-$ odmah sledi da možemo da konstruišemo sledeći konačni niz vektora

$$\mid k, m=-k \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_-^q \mid km \rangle, \mid k, m=-k+1 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_-^{q-1} \mid km \rangle, ...$$

$$..., \mid k, m=k-1 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_+^{p-1} \mid km \rangle, \mid k, m=k \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_+^p \mid km \rangle,$$

gde je $m-q=-k$ i $m+p=k$. Iz (6.2.24c) i (6.2.26c) se može zaključiti da su svi ovi vektori različiti od nule. *Q. E. D.*

Vraćajući se na ono što nismo dokazali u ovom odeljku, istaknimo da je isključivo bilo reči o *diskretnom spektru* $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$, pošto smo uvek polazili od pretpostavke da je dat $\mid km \rangle$ sa $\langle km \mid km \rangle = 1$. Znači, naši rezultati ne isključuju mogućnost postojanja i kontinualnog spektra pomenutih opservabli; šta više, čak i ne garantuju postojanje diskretnog spektra (sve je "ako, onda"). Međutim, ispostaviće se u odeljcima niže da $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$ u svim slučajevima od interesa u kvantnoj mehanici imaju čisto diskretan spektar[6.2.5].

Napomenimo, na kraju, da u svim rezultatima ovog odeljka bilo $\hat{K}_x$ bilo $\hat{K}_y$ mogu u potpunosti da zamene $\hat{K}_z$ i da dobijemo analogne rezultate *mutatis matandis*. To je, naravno, posledica činjenice da se $\hat{K}_x$ i $\hat{K}_y$ odnose prema $\hat{\mathbf{K}}^2$ na potpuno simetričan način u odnosu na $\hat{K}_z$ i $\hat{\mathbf{K}}^2$, kao što se čitalac može lako uveriti.

6.3 Geometrija kvantne teorije opšteg uglovnog momenta

Kvantna teorija uglovnog momenta ima mnogo toga da kaže na jeziku invarijantnih potprostora ili invarijantnih dekompozicija prostora stanja. To s jedne strane dopunjava rezultate o spektru $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$, dajući ne samo zajedničke svojstvene vektore ove dve opservable, već i važne potprostore za $\hat{\mathbf{K}}$ kao celinu. S druge strane, isti potprostori imaju veliku važnost za bilo koji linearni operator koji komutira sa $\hat{\mathbf{K}}$.

Tako će detaljno proučavanje pomenutih potprostora, čemu je posvećen ovaj odeljak, osposobiti čitaoca da bolje razume primenu kvantne teorije uglovnog momenta kojom ćemo se koristiti u narednim glavama.

6.3.1 Osnovne dekompozicije prostora stanja

Pretpostavićemo (za ceo odeljak) da $\hat{\mathbf{K}}^2$ ima čisto diskretan spektar. Svojstveno razlaganje Hilbert-ovog prostora $\mathcal{H}$ po $\hat{\mathbf{K}}^2$, tj. razlaganje $\mathcal{H}$ na svojstvene potprostore od $\hat{\mathbf{K}}^2$, pisaćemo u vidu[6.3.1]:

$$\boxed{\mathcal{H} = \oplus_k \mathcal{V}_k}. \tag{6.3.1}$$

[6.2.5] U stvari, to je matematički opšti slučaj, jer su sve ireducibilne reprezentacije grupe SU(2), pa prema tome i rotacione grupe koju generiše $\hat{\mathbf{K}}$ konačno dimenzionalne.

Oznaka $\oplus$ se odnosi na ortogonalni zbir potprostora. Kvantni broj k ne uzima unapred određen skup vrednosti u opštem slučaju, već one zavise od konkretne prirode vektorske opservable $\hat{\mathbf{K}}$.

Zadatak 6.3.1 Pokazati da je svaki svojstveni potprostor $\mathcal{V}_k$ od $\hat{\mathbf{K}}^2$ invarijantni prostor[6.3.2] za $\hat{\mathbf{K}}$.

Razlaganje (6.3.1) je, kako se kaže, *invarijantna dekompozicija prostora stanja.* To znači da je svaki sabirak invarijantan potprostor za $\hat{\mathbf{K}}$. Treba dobro zapaziti da je reč o relativnom pojmu: o invarijantnoj dekompoziciji u odnosu na $\hat{\mathbf{K}}$.

Neka je k proizvoljna fiksirana vrednost kvantnog broja uglovnog momenta koja se pojavljuje u $\mathcal{H}$ (tj. za koju se $\mathcal{V}_k \neq 0$ pojavljuje u (6.3.1)). Izvršimo svojstvenu dekompoziciju od $\mathcal{V}_k$ koja odgovara opservabli $\hat{K}_z$ (kompatibilnoj sa $\hat{\mathbf{K}}^2$, kao što smo videli):

$$\boxed{\mathcal{V}_k = \oplus_{m=-k}^{k} \mathcal{V}_{km}}, \tag{6.3.2}$$

gde je $\mathcal{V}_{km}$ zajednički svojstveni potprostor od $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$, koji odgovara svojstvenim vrednostima $k(k+1)\hbar^2$ odnosno $m\hbar$. Za razliku od (6.3.1), u (6.3.2) znamo da imamo $2k+1$ sabiraka, tj. da $m = -k, -k+1, ..., k$, a u to smo sigurni na osnovu Teorema T 6.2.2.

6.3.2 Jednakost dimenzija potprostora $\mathcal{V}_{km}$

Obeležimo sa d_k dimenziju potprostora $\mathcal{V}_{k,m=k}$:

$$d_k \stackrel{\text{def}}{=} \dim \mathcal{V}_{k,m=k}; \tag{6.3.3}$$

jasno, d_k može biti ceo pozitivan broj ili potencija prebrojivo beskonačnog skupa, $\aleph_0$ (tzv. alef nula, uporediti 2.1.4).

Lema 6.3.1 *Dimenzija potprostora $\mathcal{V}_{km}$ ne zavisi od m, tj.* $\dim \mathcal{V}_{km} = \mathcal{V}_{kk} = d_k$, $m = -k, ..., k$.

Dokaz: Neka je $\{| \, k, m=k, \lambda \rangle | \lambda = 1, ..., d_k\}$ proizvoljan bazis u $\mathcal{V}_{k,m=k}$ (λ prebrojava bazisne elemente, k i m su fiksirani). Višestrukom primenom operatora $\hat{K}_-$ na $| \, k, m=k, \lambda \rangle$ možemo da konstruišemo vektore (kao u dokazu Teorema T 6.2.2):

$$| \, km\lambda \rangle \stackrel{\text{def}}{=} C_{m\lambda} \hat{K}_-^{k-m} \, | \, k, m=k, \lambda \rangle, \quad m = -k, ..., k, \tag{6.3.4}$$

gde su $C_{m\lambda}$ pozitivne normalizacione konstante (pošto dobijeni vektori nisu nužno normirani), a $\hat{K}_-^0 = \hat{I}$. Za bilo koju vrednost $m = -k, -k+1, ..., k-1$ imamo:

$$\begin{aligned} \langle \, km\lambda \mid km\lambda' \rangle &= C'_{m\lambda} C'_{m\lambda'} \langle k, m+1, \lambda \mid \hat{K}_+ \hat{K}_- \mid k, m+1, \lambda' \rangle \\ &= C'_{m\lambda} C'_{m\lambda'} (k(k+1) - (m+1)m) \hbar^2 \langle \, k, m+1, \lambda \mid k, m+1, \lambda' \rangle. \end{aligned} \tag{6.3.5}$$

[6.3.1] Da nismo pretpostavili da $\hat{\mathbf{K}}^2$ ima čisto diskretan spektar, imali bismo umesto (6.3.1) formulu $\mathcal{H}_d = \oplus_k \mathcal{V}_k$, a $\mathcal{H} = \mathcal{H}_d \oplus \mathcal{H}_k$ bi bilo razlaganje $\mathcal{H}$ na potprostor $\mathcal{H}_d$, koji obrazuju pravi svojstveni vektori od $\hat{\mathbf{K}}^2$, i na $\mathcal{H}_k$, koji je ortogonalni komplement od $\mathcal{H}_d$, tj. potprostor koji odgovara kontinualnom spektru od $\hat{\mathbf{K}}^2$ (uporediti (2.3.12a)). Pomenuta pretpostavka je u stvari bila nagoveštaj činjenice da je nužno $\mathcal{H}_k = 0$ (uporediti primedbu 6.2.5).

[6.3.2] Podsetimo se da je invarijantni potprostor za $\hat{\mathbf{K}}$ potprostor u $\mathcal{H}$ takav da za svaki njegov vektor $| \, x \rangle$ i likovi $\hat{K}_q \mid x \rangle$, $q = x, y, z$ pripadaju tom potprostoru; drugim rečima, nijedan od pomenutih operatora ne izbacuje vektore iz tog potprostora.

Podsetimo se opet da je $\langle k, m+1, \lambda \mid \hat{K}_+$ bra od $\hat{K}_- \mid k, m+1, \lambda \rangle$, a $C'_{m\lambda}$ i $C'_{m\lambda'}$ su neke, za nas nevažne, konstante; u poslednjem koraku smo iskoristili funkcionalnu zavisnost (6.2.20). Iz (6.3.5) je očigledno da ortogonalnost $\langle k, m=k, \lambda \mid k, m=k, \lambda' \rangle = 0$ za $\lambda \neq \lambda'$ (po našoj stalnoj konvenciji, pod bazisom u $\mathcal{V}_{k,m=k}$ se podrazumeva ortonormirani bazis) ima za posledicu $\langle k, m=k-1, \lambda \mid k, m=k-1, \lambda' \rangle = 0$, a ovo sa svoje strane povlači ortogonalnost odgovarajućih vektora u $\mathcal{V}_{k,m=k-2}$ itd., sve do potprostora $\mathcal{V}_{k,m=-k}$. To znači da u svakom potprostoru $\mathcal{V}_{km}$ imamo d_k nenultih ortogonalnih vektora $\mid km\lambda \rangle$ (uporediti dokaz Teorema T 6.2.2). Stoga svaki $\mathcal{V}_{km}$, $m=-k,...,k-1$, ima dimenziju bar d_k. Da nijedan $\mathcal{V}_{km}$, $m=-k,...,k-1$ nema dimenziju veću od d_k sledi iz simetrične uloge koju igraju $\hat{K}_+$ i $\hat{K}_-$. Naime, mogli bismo poći od $\mathcal{V}_{k,m=-k}$ i višestrukom primenom $\hat{K}_+$ preslikati bazis iz $\mathcal{V}_{k,m=-k}$ u takođe ortogonalni skup nenultih vektora u $\mathcal{V}_{km}$, $m=-k+1,...,k$. *Q. E. D.*

6.3.3 Standardan bazis

Iz dokaza Leme L 6.3.1 proizlazi da proizvoljni bazis u $\mathcal{V}_{k,m=k}$ putem (6.3.4) generiše bazis u celom prostoru $\mathcal{V}_k$ (samo treba da se izračunaju konstante).

Definicija 6.3.1 *Standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}}$ u $\mathcal{H}$ dobija se na sledeći način: neka je za svako k jedan proizvoljan bazis u $\mathcal{V}_{k,m=k}$ označen sa $\{\mid k, m=k, \lambda \rangle \mid \lambda = 1,2,...,d_k\}$. Iz vektora tog bazisa konstruišemo nove vektore*

$$\mid km\lambda \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hbar^{m-k} \sqrt{\frac{(k+m)!}{(2k)!(k-m)!}} \hat{K}_-^{k-m} \mid k, m=k, \lambda \rangle \tag{6.3.6}$$

u svim potprostorima $\mathcal{V}_{km}$, $m=k-1, k-2, ..., -k$.

Treba zapaziti da je fazni faktor svakog bazisnog vektora $\mid k, m=k, \lambda \rangle$, $\lambda = 1,2,...,d_k$, proizvoljan, a fazni faktori svih ostalih $\mid km\lambda \rangle$, $m \leq k$, jednoznačno slede iz (6.3.6).

Zadatak 6.3.2 Pokazati da iz (6.2.26c) sledi normalizacioni faktor za $\mid km\lambda \rangle$ kao što je napisano u (6.3.6). (Indikacija: Dokazati prvo identitet: $k(k+1) - m(m-1) = (k+m)(k-m+1)$.)

Definicija standardnog bazisa (6.3.6), koja, naravno, pretpostavlja i važenje osnovnih svojstvenih jednakosti (6.2.21) je konstruktivna; to će reći, ona daje algoritam konstrukcije vektora dotičnog bazisa. Često je pogodnija ekvivalentna definicija multipleta standardnog bazisa koju ćemo dati niže (u Zadatku Z 6.3.6). Treću ekvivalentnu definiciju izrazićemo pomoću transformacionih osobina bazisa pod rotacijama (videti ispod (6.4.5)).

Standardan podbazis u $\mathcal{V}_k$ je, kako se kaže, adaptiran na dekompoziciju potprostora (6.3.2). To će reći da se ovaj podbazis može grupisati u manje podbazise koji obrazuju pojedine sabirke $\mathcal{V}_{km}$. Očigledno $\{\mid km\lambda \rangle \mid \lambda = 1,2...\}$, $m=-k,...,k$ su ti podbazisi.

Pažljivi čitalac je po svoj prilici uočio da je standardan bazis adaptiran i na jednu drugu dekompoziciju od $\mathcal{V}_k$:

$$\boxed{\mathcal{V}_k = \oplus_{\lambda=1}^{d_k} \mathcal{V}_{k\lambda}}, \tag{6.3.7}$$

gde podbazis $\{\mid km\lambda \rangle \mid m=-k,...,k\}$ — ono što zovemo multipletom — obrazuje $(2k+1)$-dimenzionalni potprostor $\mathcal{V}_{k\lambda}$, $\lambda = 1,...,d_k$.

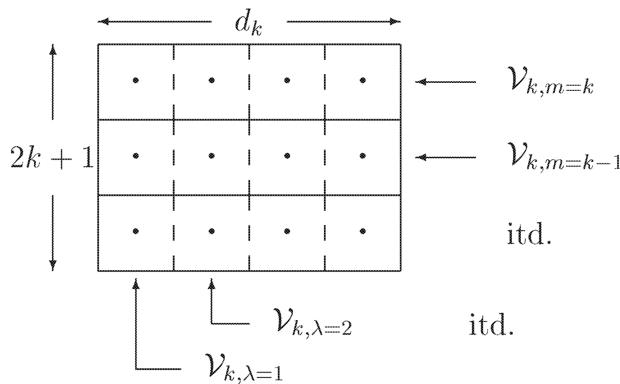
6.3.4 Dijagram "ormar sa fiokama"

Da bi izložena geometrija dva "unakrsna" razlaganja svojstvenog potprostora $\mathcal{V}_k$ operatora $\hat{\mathbf{K}}^2$ bila lakše razumljiva, uvodimo na Crtežu C 6.2 dijagram, koji možemo šaljivo nazvati "ormar sa fiokama".

Dijagramatski (6.3.2) predstavlja razlaganje pravougaonika ($\mathcal{V}_k$) na vrste ili "fioke" ($\mathcal{V}_{km}$), a (6.3.7) je razlaganje pravougaonika na kolone ($\mathcal{V}_{k\lambda}$). Zajedno, ova dva razlaganja dekomponuju $\mathcal{V}_k$ do pravaca, koji su na dijagramu predstavljeni kvadratićima (ovi pravci su, naravno, ortogonalni).

Vrste $\mathcal{V}_{km}$ su oivičene neprekidnim linijama, što odražava činjenicu da su $\mathcal{V}_{km}$ jednoznačno definisani[6.3.3] operatorom $\hat{\mathbf{K}}$. Kolone $\mathcal{V}_{k\lambda}$, međutim, oivičene su isprekidanim vertikalnim crtama. To treba da nas podseti na činjenicu da iz zadatog $\hat{\mathbf{K}}$ uopšte ne proističe kako treba definisati potprostore $\mathcal{V}_{k\lambda}$. Kao što smo videli, njih u stvari dobijamo savršeno proizvoljnim izborom bazisa u $\mathcal{V}_{k,m=k}$. (Mogli bismo uzeti bilo koji drugi $\mathcal{V}_{km}$ umesto $\mathcal{V}_{k,m=k}$ za ovu svrhu.)

Zadatak 6.3.3 Pokazati da je svaki $\mathcal{V}_{k\lambda}$ invarijantan potprostor za $\hat{\mathbf{K}}$, a da nijedan $\mathcal{V}_{km}$ to nije (osim ako je $k = 0$).



Slika 6.2: **Ormar sa fiokama.** *Ceo pravougaonik je $\mathcal{V}_k$, m-ta vrsta ili "fioka" je $\mathcal{V}_{km}$, a kolona λ je $\mathcal{V}_{k\lambda}$. Svaki kvadrat je jednodimenzionalni potprostor, razapet vektorom $\mid km\lambda\,\rangle$ (tačka u kvadratu).*

Dakle, kolone $\mathcal{V}_{k\lambda}$ su invarijantni potprostori za sam vektorski operator uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}$, baš kao i ceo $\mathcal{V}_k$. Nameće se pitanje da li se pojedini $\mathcal{V}_{k\lambda}$ mogu još više usitniti, na još manje invarijantne potprostore za $\hat{\mathbf{K}}$. Odgovor je negativan. Kaže se da su potprostori $\mathcal{V}_{k\lambda}$ *ireducibilni* ili *nesvodivi*, što znači da ne sadrže nijedan netrivijalni (tj. različit od nultog i celog $\mathcal{V}_{k\lambda}$) invarijantan potprostor za $\hat{\mathbf{K}}$. Ovo očigledno sledi iz delovanja $\hat{K}_+$ i $\hat{K}_-$ (uporediti Teorem T 6.2.2).

Kao što sugeriše dijagram "ormar sa fiokama", razlaganja potprostora $\mathcal{V}_k = \oplus_{m=-k}^{k}\mathcal{V}_{km}$ i $\mathcal{V}_k = \oplus_{\lambda=1}^{d_k}\mathcal{V}_{k\lambda}$ su, kako se kaže, kompatibilna. Naime, uvek može da se piše

$$\mathcal{V}_k = \mathcal{V}_k \cap \mathcal{V}_k = (\oplus_{m=-k}^{k}\mathcal{V}_{km}) \cap (\oplus_{\lambda=1}^{d_k}\mathcal{V}_{k\lambda}),$$

ali pri tome važi i (dvostruka) distributivnost, karakteristična samo za tzv. kompatibilna razlaganja:

$$\mathcal{V}_k = \oplus_{m,\lambda}(\mathcal{V}_{km} \cap \mathcal{V}_{k\lambda}). \tag{6.3.8}$$

Potprostori $\mathcal{V}_{km} \bigcap \mathcal{V}_{k\lambda}$ su jednodimenzionalni, to su kvadratići na dijagramu.

Kompatibilnost je lakše razumeti na jeziku opservabli. Potprostori $\mathcal{V}_{km}$ su svojstveni potprostori od $\hat{K}_z$. Pretpostavimo da postoji jedna opservabla $\hat{A}$ u $\mathcal{H}$ takva da za svako k ona

[6.3.3] Definicija od $\hat{\mathbf{K}}$ uključuje izbor koordinatnih osa. Ako bismo rotacijom promenili ove ose, promenili bi se i operatori $\hat{K}_q$ $(q = x, y, z)$, te i potprostori $\mathcal{V}_{km}$ (ali ne $\hat{\mathbf{K}}^2$, pa ni potprostori $\mathcal{V}_k$).

određuje dekompoziciju $\mathcal{V}_k = \oplus_\lambda \mathcal{V}_{k\lambda}$ kao svoju svojstvenu dekompoziciju. Drugim rečima, neka se opservabla $\hat{A}$ može napisati u sledećoj spektralnoj formi

$$\hat{A} = \sum_k \sum_\lambda a_{k\lambda} \sum_{m=-k}^{k} \mid km\lambda\rangle\langle km\lambda \mid . \qquad (6.3.9)$$

Lako se vidi (po delovanju na standardni podbazis u $\mathcal{V}_k$) da $\hat{A}$ komutira sa $\hat{\mathbf{K}}$, stoga i sa $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$ i, znači, redukuje se[6.3.4] u svakom potprostoru $\mathcal{V}_k$ i $\mathcal{V}_{km}$.

U stvari kompatibilnost opservabli $\hat{A}$ i $\hat{K}_z$ je ekvivalentna relaciji (6.3.8) i predstavlja suštinu kompatibilnosti pomenutih dekompozicija od $\mathcal{V}_k$. Pošto $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$ ne čine u opštem slučaju potpun skup kompatibilnih opservabli, možemo ih dopuniti opservablom $\hat{A}$.

6.3.5 Vektorska matrica opšteg uglovnog momenta

Lema 6.3.2 *Vektorski operator opšteg uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}$ se u standardnom bazisu reprezentuje vektorskom matricom $\mathbf{K}$, pri čemu matrični elementi glase:*

$$(K_z)_{km\lambda,k'm'\lambda'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle km\lambda \mid \hat{K}_z \mid k'm'\lambda'\rangle = m\hbar\delta_{kk'}\delta_{mm'}\delta_{\lambda\lambda'}, \qquad (6.3.10)$$

$$(K_x)_{km\lambda,k'm'\lambda'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle km\lambda \mid \hat{K}_x \mid k'm'\lambda'\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{k(k+1)-mm'}\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}(\delta_{m,m'+1}+\delta_{m,m'-1}), \qquad (6.3.11)$$

$$(K_y)_{km\lambda,k'm'\lambda'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle km\lambda \mid \hat{K}_y \mid k'm'\lambda'\rangle = \frac{\hbar}{2\imath}\sqrt{k(k+1)-mm'}\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}(\delta_{m,m'+1}-\delta_{m,m'-1}). \qquad (6.3.12)$$

Dokaz: Formula (6.3.10) očigledno sledi iz činjenice da je $\mid k'm'\lambda'\rangle$ svojstveni vektor od $\hat{K}_z$ i to sa svojstvenom vrednošću $m'\hbar$ (zbog Kronecker-ovog simbola možemo staviti m umesto m'). Formule (6.3.11) i (6.3.12) su neposredna posledica operatorskih relacija

$$\hat{K}_x = \frac{1}{2}(\hat{K}_+ + \hat{K}_-), \quad \hat{K}_y = \frac{1}{2\imath}(\hat{K}_+ - \hat{K}_-) \qquad (6.3.13a,b)$$

(uporediti (6.2.14)), kao i oblika matričnih reprezentanata za $\hat{K}_+$ i $\hat{K}_-$ u standardnom bazisu:

$$(K_+)_{km\lambda,k'm'\lambda'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle km\lambda \mid \hat{K}_+ \mid k'm'\lambda'\rangle = \hbar\sqrt{k(k+1)-mm'}\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{m,m'+1}, \qquad (6.3.14a)$$

$$(K_-)_{km\lambda,k'm'\lambda'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle km\lambda \mid \hat{K}_- \mid k'm'\lambda'\rangle = \hbar\sqrt{k(k+1)-mm'}\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{m,m'-1}. \qquad (6.3.14b)$$

Jednakost (6.3.14*b*), sa svoje strane, neposredno sledi iz (6.3.6), a (6.3.14*a*) se dobija adjungovanjem matrice K_-. *Q. E. D.*

Zadatak 6.3.4 Dokazati poslednja dva iskaza.

Istaknimo ponovo da se $\hat{K}_+$ i $\hat{K}_-$, kao i $\hat{K}_q$ $(q = x, y, z)$ redukuju[6.3.5] u svakom potprostoru $\mathcal{V}_k$.

[6.3.4] Redukovanje nekog operatora $\hat{A}$ u nekom potprostoru $\mathcal{V}$ je u stvari sinonim za invarijantnost $\mathcal{V}$ za $\hat{A}$. Ipak termin "redukovanje" sadrži malu emfazu na tu okolnost da $\hat{A}$, ne izbacujući nijedan vektor iz $\mathcal{V}$, u stvari indukuje jedan operator $\hat{A}_{\mathcal{V}}$ u $\mathcal{V}$ (koji u $\mathcal{V}$ deluje isto kao $\hat{A}$, ali domen mu je ograničen na $\mathcal{V}$).

[6.3.5] Pojam redukovanja je lako razumeti na matričnom jeziku. Uzmimo u $\mathcal{H}$ bazis adaptiran na dekompoziciju $\mathcal{H} = \mathcal{V} \oplus \mathcal{V}^\perp$ i reprezentujmo operator $\hat{A}$ u tom bazisu matricom A. Invarijantnost potprostora $\mathcal{V}$ i $\mathcal{V}^\perp$ ogledaće se u tzv. kvazidijagonalnoj formi $A = \begin{pmatrix} A_{\mathcal{V}} & 0 \\ 0 & A_{\mathcal{V}^\perp} \end{pmatrix}$. Redukcija u $\mathcal{V}$ onda znači da se umesto A uzima podmatrica $A_{\mathcal{V}}$.

Zadatak 6.3.5 Pokazati da se (6.3.14a) i (6.3.14b) mogu prepisati u formi (dvostruke) jednakosti:

$$\hat{K}_{\pm} \mid km\lambda\rangle = \sqrt{k(k+1) - m(m\pm 1)}\hbar \mid k, m\pm 1, \lambda\rangle. \tag{6.3.14c,d}$$

Zadatak 6.3.6 Pokazati da (6.3.14c) i (6.3.14d) zajedno sa svojstvenim jednakostima (6.2.21), mogu da posluže kao ***druga definicija*** multipleta (podbazisa) ***standardnog bazisa*** za $\hat{\mathbf{K}}$, jer su ekvivalentne konstruktivnoj formuli (6.3.6) (uz (6.2.21)).

Treba obratiti pažnju na vid matrica K_z, K_x i K_y datih sa (6.3.10)-(6.3.12). K_z je dijagonalna matrica, a druge dve su kvazidijagonalne (one su po jednostavnosti odmah do dijagonalnih). Vrste i kolone prebrojavamo sa po tri indeksa. Uzmimo ih u poretku $k\lambda m$ (ne kao u (6.3.10)-(6.3.12)) i varirajmo ih alfabetskim redom (prvo variramo samo m fiksiravši k i λ itd.). Onda na Crtežu C 6.3A vidimo šta znači kvazidijagonalnost (recimo matrice K_x).

$$\begin{pmatrix} \square & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \square & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \square & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} \square & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \square & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \square & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \square & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

A) B)

Slika 6.3: **Dijagonalizacija matrica uglovnog momenta.**

Svi matrični elementi od K_x su nule, osim (možda) unutar kvadratnih podmatrica na dijagonali (izražene kvadratićima na Crtežu C 6.3). Ove podmatrice odgovaraju fiksiranim k i λ (istim za vrste i kolone pošto su na dijagonali), a unutar njih elemente prebrojava m (i vrste i kolone), tj. one su tipa $(2k+1)\times(2k+1)$. (Što se tiče svrhe Crteža C 6.3B), videti kraj paragrafa § 6.3.7.)

Zadatak 6.3.7 Ispisati eksplicitno matricu K_x pod pretpostavkom da k uzima vrednosti $\frac{1}{2}$ i $\frac{3}{2}$, a da λ uzima samo po jednu vrednost za oba k, tako da ga možemo izostaviti.

6.3.6 Matematički podsetnik — ekvivalentni operatori

Neka su $\mathcal{V}$ i $\mathcal{V}'$ dva izomorfna Hilbert-ova prostora ili potprostora jednog Hilbert-ovog prostora $\mathcal{H}$. Kao što je poznato, za izomorfnost je potrebna i dovoljna jednaka dimenzionalnost $\mathcal{V}$ i $\mathcal{V}'$.

Neka su $\hat{A}$ i $\hat{A}'$ operatori definisani u $\mathcal{V}$ odnosno u $\mathcal{V}'$. Za takva dva operatora se kaže da su ekvivalentni ako postoji izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}$ potprostora $\mathcal{V}$ na $\mathcal{V}'$ koji, transformacijom sličnosti, prevodi $\hat{A}$ u $\hat{A}'$:

$$\hat{A}' = \hat{\mathcal{J}}\hat{A}\hat{\mathcal{J}}^{-1}. \tag{6.3.15}$$

Jednakost (6.3.15) znači da se delovanje operatora $\hat{A}$, $\hat{A} \mid x\rangle = \mid y\rangle$ ($\mid x\rangle, \mid y\rangle \in \mathcal{V}$) prevodi u $(\hat{\mathcal{J}}\hat{A}\hat{\mathcal{J}}^{-1})\hat{\mathcal{J}} \mid x\rangle = \hat{\mathcal{J}} \mid y\rangle \leftrightarrow \hat{A}'(\hat{\mathcal{J}} \mid x\rangle) = \hat{\mathcal{J}} \mid y\rangle$. Više opisno, kaže se da $\hat{A}$ i $\hat{A}'$ jednako deluju u $\mathcal{V}$ odnosno u $\mathcal{V}'$ ("jednakost" ostvaruje $\hat{\mathcal{J}}$).

Za primenu pojma ekvivalentnosti dva operatora važni su sledeći stavovi.

Stav 6.3.1 *Operator $\hat{A}$ u prostoru $\mathcal{V}$ i operator $\hat{A}'$ u izomorfnom prostoru $\mathcal{V}'$ su ekvivalentni ako i samo ako postoji po jedan bazis u $\mathcal{V}$ i $\mathcal{V}'$, tako da se $\hat{A}$ i $\hat{A}'$ u njima reprezentuju istom matricom A. Naime, kada je to slučaj, onda se izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}$ u (6.3.15) može definisati tim parom bazisa, tj. zahtevom da $\hat{\mathcal{J}}$ prevodi dotični bazis iz $\mathcal{V}$ u dotični bazis u $\mathcal{V}'$. I obratno, ako imamo izomorfizam $\hat{\mathcal{J}} : \mathcal{V} \to \mathcal{V}'$, takav da je (6.3.15) zadovoljeno, onda uzimajući proizvoljan bazis u $\mathcal{V}$ kao prvi, a njegov lik po $\hat{\mathcal{J}}$ kao drugi bazis, matrica koja reprezentuje $\hat{A}$ u prvom bazisu je nužno jednaka matrici koja reprezentuje $\hat{A}'$ u drugom bazisu.*

Stav 6.3.2 *Ako su $\hat{A}$ u $\mathcal{V}$ i $\hat{A}'$ u $\mathcal{V}'$ ekvivalentni operatori, onda oni imaju identičan spektar (sa jednakom degeneracijom istih svojstvenih vrednosti, kako diskretnih tako i kontinualnih), a izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}$ koji zadovoljava (6.3.15) preslikava svaki svojstveni potprostor od $\hat{A}$ na svojstveni potprostor od $\hat{A}'$ koji odgovara istoj svojstvenoj vrednosti.*

6.3.7 Redukcija uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}$

Teorem 6.3.1 *Neka su $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda}$, $\lambda = 1, 2, ..., d_k$, vektorski operatori u koje se $\hat{\mathbf{K}}$ redukuje u pojedinim svojim ireducibilnim invarijantnim potprostorima $\mathcal{V}_{k\lambda}$. Onda su svi $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda}$, $\lambda = 1, 2, ..., d_k$ za fiksirano k uzajamno* ekvivalentni. *U tom smislu $\mathcal{V}_k$ je višestruki (u stvari d_k-struki) ireducibilni invarijantni potprostor za $\hat{\mathbf{K}}$, određen kvantnim brojem k.*

Dokaz: Fiksirajmo dva proizvoljna potprostora $\mathcal{V}_{k\lambda_1}$ i $\mathcal{V}_{k\lambda_2}$, $\lambda_1 \neq \lambda_2$ (dve kolone na dijagramu "ormar sa fiokama"). U $\mathcal{V}_{k\lambda_1}$ imamo podbazis standardnog bazisa $\{\mid km\lambda_1\rangle \mid m = -k, ..., k\}$ i analogno u $\mathcal{V}_{k\lambda_2}$.
Pogledajmo sad matricu $\mathbf{K}$ datu sa (6.3.10)-(6.3.12). Jasno je da redukciji operatora $\hat{\mathbf{K}}$ u operatore $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda_1}$ i $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda_2}$ u potprostorima $\mathcal{V}_{k\lambda_1}$ odnosno $\mathcal{V}_{k\lambda_2}$ na matričnom jeziku odgovara ograničavanje na podmatrice u $\mathbf{K}$, i to na one koje se dobijaju fiksiranjem $k = k'$, $\lambda = \lambda' = \lambda_1$, odnosno $k = k'$, $\lambda = \lambda' = \lambda_2$. To su $(2k + 1) \times (2k + 1)$ podmatrice $\mathbf{K}_{k\lambda_1}$ i $\mathbf{K}_{k\lambda_2}$ (vrste i kolone prebrojava m) na dijagonali od $\mathbf{K}$.
Uočimo da su pomenute podmatrice nezavisne od λ, tj. redukovani operatori $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda_1}$ i $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda_2}$ se jednako reprezentuju u podbazisu $\{\mid km\lambda_1\rangle | m = -k, ..., k\}$ odnosno $\{\mid km\lambda_2\rangle | m = -k, ..., k\}$. Na osnovu Stava S 6.3.1 time je dokazan iskaz Teorema T 6.3.1. *Q. E. D.*

Ako definišemo izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}$ potprostora $\mathcal{V}_{k\lambda_1}$ na $\mathcal{V}_{k\lambda_2}$ pomoću odgovarajućih multipleta iz standardnog bazisa: $\hat{\mathcal{J}} \mid km\lambda_1\rangle = \mid km\lambda_2\rangle$, $m = -k, ..., k$, onda dobijamo

$$\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda_2} = \hat{\mathcal{J}}\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda_1}\hat{\mathcal{J}}^{-1} \tag{6.3.16}$$

(u stvari $\hat{\mathcal{J}}$ zavisi od izbora vrednosti za k, λ_1, λ_2).

Sad je jasno da dekompozicija

$$\mathcal{H} = \oplus_k \oplus_{\lambda=1}^{d_k} \mathcal{V}_{k\lambda} \tag{6.3.17}$$

ne samo da rastavlja $\mathcal{H}$ na potprostore koji su invarijantni i ireducibilni za $\hat{\mathbf{K}}$, tj. predstavlja maksimalnu invarijantnu dekompoziciju od $\mathcal{H}$ što se tiče $\hat{\mathbf{K}}$, nego imamo i ekvivalentnost redukovanih operatora $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda}$, $\lambda = 1, ..., d_k$ u potprostorima $\mathcal{V}_{k\lambda}$.

Na jeziku matrica K_z, K_x i K_y ((6.3.10)-(6.3.12)), Teorem T 6.3.1 kaže samo to da su podmatrice (na dijagonali) koje odgovaraju fiksiranom k a različitim λ (videti Crtež C 6.3B), sve jednake među sobom. Na Crtežu C 6.3B) nizove od po d_k jednakih podmatrica na dijagonali prebrojava k, unutar tih nizova same jednake podmatrice prebrojava λ, a unutar svake podmatrice matrične elemente prebrojava m (i vrste i kolone).

6.3.8 Redukcija opservable kompatibilne sa $\hat{\mathbf{K}}$

Nameće se pitanje šta u stvari znači ova višestrukost (tj. d_k-strukost) koja se pojavljuje u našim rezultatima; bolje reći, ima li od nje (ili pak od "fioka" "ormara sa fiokama") ikakve koristi. Pozitivan odgovor daje nam sledeći rezultat.

Teorem 6.3.2 *Neka je $\hat{A}$ linearni operator koji komutira sa $\hat{\mathbf{K}}$, tj.*

$$[\,\hat{A}, \hat{\mathbf{K}}\,] = 0. \tag{6.3.18}$$

Onda se $\hat{A}$ redukuje u svakom potprostoru $\mathcal{V}_{km}$, $m = -k, ..., k$. Neka se $\hat{A}$ u $\mathcal{V}_{km}$ redukuje u $\hat{A}_{km}$. Za fiksirano k svi su $\hat{A}_{km}$ uzajamno ekvivalentni.

Dokaz: Kao što znamo, podbazis $\{|\, km\lambda\,\rangle \mid \lambda = 1, ..., d_k\}$ je bazis u $\mathcal{V}_{km}$. Iz $\hat{\mathbf{K}}^2(\hat{A} \mid km\lambda\,\rangle) = \hat{A}\hat{\mathbf{K}}^2 \mid km\lambda\,\rangle = k(k+1)\hbar^2(\hat{A} \mid km\lambda\,\rangle)$ i iz analogne jednakosti za $\hat{K}_z$ sledi da $\hat{A}$ ne može da izbaci nijedan vektor navedenog podbazisa iz potprostora $\mathcal{V}_{km}$, drugim rečima potprostor $\mathcal{V}_{km}$ je invarijantan za $\hat{A}$. Time je prvi iskaz Teorema T 6.3.2 dokazan.
Da bismo u narednom rezonovanju radi lakše prezentacije izbegli Dirac-ovu notaciju, prepišimo vektore standardnog bazisa u vidu: $\psi_{km\lambda} \stackrel{\mathrm{def}}{=} |\, km\lambda\,\rangle$.
Fiksirajmo dva proizvoljna potprostora $\mathcal{V}_{km_1}$ i $\mathcal{V}_{km_2}$, $m_2 > m_1$. Definišimo izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}$ prvog na drugi jednakostima:

$$\hat{\mathcal{J}}\psi_{km_1\lambda} = \psi_{km_2\lambda} \Leftrightarrow \hat{\mathcal{J}}^{-1}\psi_{km_2\lambda} = \psi_{km_1\lambda}, \quad \lambda = 1, ..., d_k. \tag{6.3.19a,b}$$

Na osnovu konstrukcije standardnog bazisa znamo da je

$$\hat{\mathcal{J}} = C_{km_1m_2}\hat{K}_+^{m_2-m_1} \tag{6.3.19c}$$

(gde je $C_{km_1m_2}$ za nas sad nevažna konstanta) uz ograničenje domena operatora na DS-i na $\mathcal{V}_{km_1}$. Uzmimo $\lambda\lambda'$-ti matrični element u matrici koja reprezentuje redukovani operator $\hat{A}_{km_1}$:

$$(A_{km_1})_{\lambda\lambda'} = \langle\psi_{km_1\lambda} \mid \hat{A} \mid \psi_{km_1\lambda'}\,\rangle = (\hat{\mathcal{J}}^{-1}\psi_{km_2\lambda}, \hat{A}\hat{\mathcal{J}}^{-1}\psi_{km_2\lambda'}).$$

Vidi se iz (6.3.19a) da je $\hat{\mathcal{J}}$ izometrički operator, tj. da održava skalarni proizvod (pri preslikavanju $\mathcal{V}_{km_1}$ na $\mathcal{V}_{km_2}$). Prema tome, u poslednjem skalarnom proizvodu na oba faktora možemo da primenimo $\hat{\mathcal{J}}$ da bismo dobili

$$(A_{km_1})_{\lambda\lambda'} = (\psi_{km_2\lambda}, \hat{\mathcal{J}}\hat{A}\hat{\mathcal{J}}^{-1}\psi_{km_2\lambda'}).$$

Iz (6.3.19c) i (6.3.18) je jasno da $\hat{\mathcal{J}}$ i $\hat{A}$ komutiraju, tj. $\hat{\mathcal{J}}\hat{A}\hat{\mathcal{J}}^{-1} = \hat{A}$. Zato

$$(A_{km_1})_{\lambda\lambda'} = (A_{km_2})_{\lambda\lambda'}, \quad \lambda = 1, ..., d_k, \tag{6.3.20}$$

i pri tome su m_1 i m_2 bilo koje dve vrednosti magnetnih kvantnih brojeva (od $2k+1$ mogućih).
Na osnovu Stava S 6.3.1, (6.3.20) dokazuje da su $\hat{A}_{km_1}$ i $\hat{A}_{km_2}$ ekvivalentni operatori. *Q. E. D.*

Zadatak 6.3.8 Izvesti dokaz kraće, preko spektralnih formi A_{km}.

Neka je operator $\hat{A}$ koji zadovoljava (6.3.18) predstavljen matricom A u standardnom bazisu za $\hat{\mathbf{K}}$. Tri indeksa kojima prebrojavamo vrste i kolone poređajmo kao $km\lambda$ (ne $k\lambda m$ kao za reprezentovanje $\hat{\mathbf{K}}$). Onda Teorem T 6.3.2 kaže da ćemo dobiti kvazidijagonalnu matricu A, koja će na dijagonali imati po $2k+1$ jednakih $d_k \times d_k$ podmatrica. Znači, A ima formu kao na Crtežu C 6.3B) (samo što su uloge od λ i m uzajamno zamenjene): k prebrojava nizove jednakih podmatrica na dijagonali, m prebrojava jednake podmatrice unutar niza, a λ prebrojava matrične elemente unutar svake podmatrice.

Najvažniji je slučaj kada je operator $\hat{A}$ koji zadovoljava (6.3.18) opservabla. Onda iz Teorema T 6.3.2 i iz gornjeg Stava S 6.3.2 sledi da svi redukovani operatori $\hat{A}_{km}$, $m = -k, ..., k$, imaju isti spektar. Stoga je dovoljno za svako k taj spektar izračunati recimo samo u $\mathcal{V}_{k,m=k}$ (u ostalim "fiokama" nalazi se isto). Kao što ćemo videti u odeljku § 8.1, ovo je naročito značajno za slučaj kada je $\hat{A}$ hamiltonijan kvantnog sistema.

***Napomena* 6.3.1** U principu moguće je opservablu $\hat{A}$ koja komutira sa $\hat{\mathbf{K}}$ izabrati tako da je $\hat{A}_{k,m=k}$, $\forall k$ kompletna opservabla sa čisto diskretnim spektrom. Onda $\hat{A}$ može da definiše dodatni kvantni broj λ i za nju važi (6.3.9). $\hat{\mathbf{K}}^2$, $\hat{K}_z$ i $\hat{A}$ čine onda potpuni skup kompatibilnih opservabli.

6.3.9 Rezime o dekompozicijama od $\mathcal{V}_k$

Za dijagram na Crtežu C 6.2 uveli smo naziv "ormar sa fiokama" imajući u vidu prvenstveno njegove "fioke". One su namenjene opservablama $\hat{A}$ koje su kompatibilne sa $\hat{\mathbf{K}}$ (ali mogu biti i transformacije simetrije ili opštiji operatori), tj. za primenu kvantne teorije uglovnog momenta na izučavanje takvih opservabli. Dekompozicija na "fioke" doduše nije maksimalna invarijantna dekompozija za $\hat{A}$, ali je ipak od velike koristi.

Ako na istom dijagramu usredsredimo pažnju na kolone, onda imamo neku vrstu vertikalnih "segmenata ormara", koji su namenjeni samoj teoriji operatora $\hat{\mathbf{K}}$. To su ireducibilni invarijantni potprostori za $\hat{\mathbf{K}}$, značajni zato što daju minimalne delove $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda}$ od $\hat{\mathbf{K}}$.

Dok su "fioke" jednoznačno određene fiksiranjem koordinatnog sistema, "sečenje" na "segmente" je potpuno van teorije uglovnog momenta. Da bi se došlo do minimalnih delova $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda}$, neophodna je neka kompatibilna opservabla $\hat{A}$ (ili više njih) koja daje pomenuto sečenje na "segmente".

6.4 Opšte rotacije

Ovo je poslednji odeljak u grupi odeljaka posvećenih kvantnoj teoriji opšteg uglovnog momenta i opštih rotacija. U ovom odeljku nećemo saznati u suštini ništa novo, ali produbićemo već poznato, uzimajući u obzir i drugu stranu medalje. Naime, kao što je čitaocu već poznato, teorija uglovnog momenta (kao algebarska teorija) je najprisnije povezana sa paralelnom teorijom rotacija (kao teorijom grupa). Videćemo da ova dva prilaza daju jednu te istu geometriju invarijantnih dekompozicija prostora stanja.

6.4.1 Grupa opštih rotacija i $\hat{\mathbf{K}}$

Navešćemo bez dokaza sledeći stav koji je posledica komutacionih relacija (6.2.7) (dokaz se može naći u knjizi pomenutoj u 6.2.1).

Stav 6.4.1 *Svakoj rotaciji u običnom prostoru pridružuje se u prostoru stanja ili jedan operator opšte rotacije* $\mathcal{H}$: $\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}}$, *ili dva operatora* $\{\hat{U}(\phi\mathbf{u}), -\hat{U}(\phi\mathbf{u})\}$. *Ovo pridruživanje je homomorfizam ili homomorfizam s tačnošću do predznaka*[6.4.1].

Kao što je poznato, homomorfizam je pridruživanje koje održava proizvod: ako $R_{\phi\mathbf{u}}R_{\psi\mathbf{v}} = R_{\theta\mathbf{w}}$ onda $\hat{U}(\phi\mathbf{u})\hat{U}(\psi\mathbf{v}) = \hat{U}(\theta\mathbf{w})$, a homomorfizam s tačnošću do predznaka daje: $\hat{U}(\phi\mathbf{u})\hat{U}(\psi\mathbf{v}) = \pm\hat{U}(\theta\mathbf{w})$ i pri tome je svejedno koji je operator od pomenuta dva $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ i isto važi i za $\hat{U}(\psi\mathbf{v})$ i $\hat{U}(\theta\mathbf{w})$

Dakle, opšte rotacije su funkcije opšteg uglovnog momenta. Postavlja se pitanje da li važi i obratno: da li su komponente opšteg uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}$ funkcije opštih rotacija.

Korolar 6.4.1 *Neka je ort* $\mathbf{u}$ *fiksiran u smeru q-te koordinatne ose,* $q = x, y, z$. *Onda važi*

$$\hat{K}_q = \imath\hbar \lim_{\phi\to 0} \frac{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) - I}{\phi}. \tag{6.4.1}$$

Dokaz: Eksponencijalna operatorska funkcija je po definiciji Taylor-ov red

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = \hat{I} - \frac{\imath}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}} - \frac{1}{2!\hbar^2}\phi^2(\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}})^2 + ... \tag{6.4.2}$$

Odavde očigledno sledi (6.4.1). *Q. E. D.*

6.4.2 Invarijantni potprostori

Značaj pomenutih funkcionalnih zavisnosti postaje jasan kada se podsetimo poznatog stava:

Stav 6.4.2 *Ako je linearni operator* $\hat{A}$ *analitička funkcija nekih linearnih operatora* $\hat{B}_1, \hat{B}_2, ...$ *(funkcija u smislu limesa polinoma) i ako se ovi operatori redukuju u nekom potprostoru* $\mathcal{V}$, *onda se u* $\mathcal{V}$ *redukuje i operator* $\hat{A}$.

Iz S 6.4.1 i S 6.4.2 i K 6.4.1 odmah sledi:

Lema 6.4.1 *Neki potprostor* $\mathcal{V}$ *je invarijantan za grupu opštih rotacija* $\{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) \mid \phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}\}$, *ako i samo ako je invarijantan za opšti uglovni moment* $\hat{\mathbf{K}}$. *Drugim rečima, pomenuta grupa i* $\hat{\mathbf{K}}$ *imaju sve invarijantne potprostore zajedničke.*

6.4.3 Ireducibilni invarijantni potprostori za rotacije

Postavlja se pitanje kako stoje stvari sa ireducibilnim invarijantnim potprostorima za grupu rotacija.

Rezonovanjem *ab contrario* iz L 6.4.1 odmah sledi da je invarijantni potprostor ireducibilan za grupu rotacija ako i samo ako je ireducibilan za $\hat{\mathbf{K}}$. Drugim rečima, $\hat{\mathbf{K}}$ i grupa rotacija $\{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) \mid \phi\mathbf{u}$ iz π-lopte$\}$ imaju samo zajedničke ireducibilne invarijantne potprostore.

Prema tome, maksimalna invarijantna dekompozicija $\mathcal{H} = \oplus_k \oplus_{\lambda=1}^{d_k} \mathcal{V}_{k\lambda}$ ima potpuno isti smisao u odnosu na grupu opštih rotacija kao i u odnosu na $\hat{\mathbf{K}}$. Preciznije:

[6.4.1] Kao što ćemo videti u odeljku § 7.5, tzv. superselekciono pravilo zabranjuje da se u Hilbert-ovom prostoru stanja fizičkog sistema pojavljuju kvantni brojevi uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}$ različite celobrojnosti; drugim rečima, mogu da se pojave ili samo celi (onda imamo u S 6.4.1 homomorfizam) ili samo poluceli (onda imamo homomorfizam s tačnošću do predznaka, uporediti primedbu 6.10.1 niže).

Teorem 6.4.1 *Kada se neka opšta rotacija $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ redukuje u ireducibilnim invarijantnim potprostorima $\mathcal{V}_{k\lambda}$ $\lambda = 1, ..., d_k$, dobijaju se ekvivalentni unitarni operatori u tim potprostorima. U tom smislu $\mathcal{V}_k$ je d_k-struki ireducibilni invarijantni potprostor za grupu opštih rotacija u $\mathcal{H}$, određen kvantnim brojem k.*

Dokaz: Uzmimo, analogno kao u dokazu analognog Teorema T 6.3.1, dve kolone na dijagramu "ormar sa fiokama": $\mathcal{V}_{k\lambda_1}$ i $\mathcal{V}_{k\lambda_2}$. Videli smo u (6.3.16) da se $\hat{\mathbf{K}}$ redukuje u ekvivalentne operatore $\hat{K}_{k\lambda_1}$, odnosno $\hat{K}_{k\lambda_2}$ u tim potprostorima. Prema Stavu S 6.4.1 imamo funkcionalnu zavisnost $\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}}$ koja se održava pri redukciji:

$$\hat{U}_{k\lambda_1}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda_1}}, \qquad \hat{U}_{k\lambda_2}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda_2}}. \tag{6.4.3a,b}$$

Eksponencijalna funkcija je u stvari red, a transformacija sličnosti $\hat{\mathcal{J}}...\hat{\mathcal{J}}^{-1}$ komutira sa svakim od operatora od kojih se red sastoji. To dovodi do

$$\hat{\mathcal{J}}\hat{U}_{k\lambda_1}(\phi\mathbf{u})\hat{\mathcal{J}}^{-1} = \hat{U}_{k\lambda_2}(\phi\mathbf{u}). \tag{6.4.4}$$

Q. E. D.

Na jeziku matrične reprezentacije u standardnom bazisu, T 6.4.1 tvrdi da su matrični elementi od (6.4.3) nezavisni od λ, tj. da na dijagonali od $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ imamo d_k jednakih podmatrica $\hat{U}_{k\lambda}(\phi\mathbf{u})$.

6.4.4 * U-funkcije i Wigner-ove D-funkcije

Reprezentovanjem rotacija $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ u standardnom bazisu za $\hat{\mathbf{K}}$ dobija se

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u}) \mid km\lambda\,\rangle = \sum_{m'=-k}^{k} U^{(k)}_{m'm}(\phi\mathbf{u}) \mid km\lambda'\,\rangle, \quad \forall k, \lambda, \phi\mathbf{u} \tag{6.4.5}$$

(sumirajući samo po m' iskoristili smo invarijantnost svakog potprostora $\mathcal{V}_{k\lambda}$). Iz teorema T 6.4.1 sledi, kao što je rečeno, jednakost d_k podmatrica na dijagonali matrice $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$. Te podmatrice su $U^{(k)}(\phi\mathbf{u})$, čiji su elementi $U^{(k)}_{m'm}(\phi\mathbf{u})$, i one, prema tome, ne zavise od λ. Jednakost (6.4.5) definiše tzv. U-funkcije na π-lopti: $U^{(k)}_{m'm}(\phi\mathbf{u})$ i predstavlja našu treću (ekvivalentnu) definiciju standardnog bazisa (prva je (6.3.6), druga (6.3.14c)-(6.3.14d)). To sledi iz sledeće leme.

Lema 6.4.2 *Ako se $2k+1$ bazisnih vektora transformiše pod rotacijama formulom (6.4.5), dakle sa poznatim U-funkcijama, onda oni nužno čine podbazis (multiplet) standardnog bazisa.*

Dokaz: Grupa matrica $\{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) \mid \phi\mathbf{u}$ iz π-lopte$\}$, čiji se elemeni) pojavljuju u (6.4.5), ireducibilna je, tako da je prostor $\mathcal{V}$, obrazovan podbazisom $\{\mid km\lambda\,\rangle \mid m = -k, ..., k\}$ definisanim sa (6.4.5) ireducibilni invarijantni potprostor za grupu rotacija i $\hat{\mathbf{K}}$. Nazovimo pomenuti bazis u $\mathcal{V}$ "starim" bazisom i odaberimo u $\mathcal{V}$ "novi" bazis za koji znamo da je standardni, recimo po pomenutoj drugoj definiciji (hoćemo da dokažemo da je i "stari" bazis standardan). Neka je $\hat{W}$ unitarni operator prelaska sa starog bazisa na novi. U novom bazisu rotacije se reprezentuju jednako kao u starom (U-matricama). Iz toga odmah sledi, kao što se lako vidi, da $\hat{W}$ komutira sa svakom rotacijom. Stoga, po poznatoj Schur-ovoj lemi (za ireducibilne skupove matrica), $\hat{W}$ mora biti konstanta. Zbog unitarnosti je onda i $\hat{W}$ fazni faktor. Kao što je poznato, multiplet standardnog bazisa se definiše jednoznačno do otvorenog faznog faktora (zajedničkog za multiplet). Prema tome, stari bazis je standardan za $\hat{\mathbf{K}}$. *Q. E. D.*

Korolar 6.4.2 *Pošto matrični elementi u (6.4.5) ne zavise od* λ, *možemo (6.4.5) da prepišemo rešeno po matričnim elementima:*

$$U^{(k)}_{mm'}(\phi\mathbf{u}) = \langle km\lambda \mid \hat{U}(\phi\mathbf{u}) \mid km'\lambda\,\rangle, \tag{6.4.6}$$

pri čemu λ *na DS-i ima bilo koju od svojih* d_k *vrednosti.*

***Napomena* 6.4.1** Treba naglasiti da su kvadratne podmatrice $U^{(k)}$ reda $2k{+}1$, čiji su elementi određeni sa (6.4.6), date jednoznačno iako odgovarajući podbazisi imaju jedan arbitrerni fazni faktor. Promena tog faznog faktora znači množenje celog multipleta istim faznim faktorom, a to se ispotire u (6.4.5).

Kada se sa jezika operatora rotacija pređe na jezik matrične reprezentacije u standardnom bazisu, obično se rotacije zadaju pomoću Euler-ovih uglova. Onda se umesto U-funkcija datih sa (6.4.6) pojavljuju tzv. *Wigner-ove D-funkcije* $D^{(k)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$. Njih implicitno i eksplicitno definišu jednakosti:

$$\hat{U}(\alpha) \mid km\lambda\,\rangle = \sum_{m'=-k}^{k} D^{(k)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) \mid km\lambda'\,\rangle, \tag{6.4.7}$$

$$D^{(k)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) \overset{\text{def}}{=} \langle km\lambda \mid \hat{U}(\alpha) \mid km\lambda\,\rangle \mid km\lambda'\,\rangle,\ \forall k,m,m',\alpha,\beta,\gamma,\ \lambda=1,....d_k. \qquad (6.4.8a,b)$$

Navešćemo bez dokaza da Wigner-ove D-funkcije zadovoljavaju *relacije ortonormiranosti*

$$\frac{1}{2}\int_0^{4\pi} \mathrm{d}(\frac{\alpha}{4\pi}) \int_0^{\pi} \mathrm{d}\beta\sin\beta \int_0^{4\pi} \mathrm{d}(\frac{\gamma}{4\pi}) D^{(k_1)^*}_{m'_1m_1}(\alpha,\beta,\gamma) D^{(k_2)}_{m'_2m_2}(\alpha,\beta,\gamma) = \frac{\delta_{k_1k_2}\delta_{m_1m_2}\delta_{m'_1m'_2}}{2k_1+1} \tag{6.4.9}$$

i kompletnosti:

$$\sum_{k=0,\frac{1}{2},1,\dots} \sum_{m=-k}^{k} \sum_{m'=-k}^{k} \frac{2k+1}{16\pi^2} D^{(k)^*}_{mm'}(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1) D^{(k)}_{mm'}(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2) = \delta(\alpha_1-\alpha_2)\delta(\cos\beta_1-\cos\beta_2)\delta(\gamma_1-\gamma_2). \tag{6.4.10}$$

U (6.4.9) integrišemo po četvorostrukom intervalu definisanosti Euler -ovih uglova, a treba samo po dvostrukom — otud faktor $\frac{1}{2}$. Dvostruki interval odgovara tzv. prekrivajućoj, grupi rotacione grupe (to je $SU(2)$); potreba za njom potiče od toga što se pojavljuju dvoznačne reprezentacije[6.4.2] (za k polucelo).

6.4.5 Redukovanje kompatibilnih opservabli

Teorem 6.4.2 *Neka je* $\hat{A}$ *linearni operator koji komutira sa svakom opštom rotacijom:*

$$[\ \hat{A}, \hat{U}(\phi\mathbf{u})\ ] = 0,\ \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}. \tag{6.4.11}$$

Onda se $\hat{A}$ *redukuje u svakom potprostoru* $\mathcal{V}_{km}$ *i to u uzajamno ekvivalentne operatore* $\hat{A}_{km}$, $m = -k, ..., k$.

[6.4.2] Analogne relacije ortonormiranosti kompletnosti važe i za U-funkcije. Videti na primer: Д.А. Варшаиович, А.Н. Москалев и В.К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента* (Наука, Ленинград, 1975), glava 4.5. Više o osobinama dosta korišćenih D-funkcija videti u istoj monografiji ili npr. u: K. Gottfried, *Quantum Mechanics, Vol. 1, Fundamentals,* (Benjamin, New York, 1966), § 34.5.

Dokaz: Iz (6.4.1) sledi da (6.4.11) ima za posledicu[6.4.3] $[\ \hat{A}, \hat{\mathbf{K}}\ ] = 0$. Onda po T 6.3.2 sledi iskaz T 6.4.2. *Q. E. D.*

Za primene naše teorije korisno je još malo bolje sagledati T 6.4.2 u celini sa T 6.3.2.

Korolar 6.4.3 *Neka je $\hat{A}$ opservabla sa čisto diskretnim spektrom u $\mathcal{H}$. Sledeća tri iskaza su ekvivalentna:*

$$\text{i)} \quad [\ \hat{A}, \hat{\mathbf{K}}\ ] = 0; \tag{6.4.12a}$$

$$\text{ii)} \quad [\ \hat{A}, \hat{U}(\phi\mathbf{u})\ ] = 0, \ \forall \phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}; \tag{6.4.12b}$$

iii) u $\mathcal{H}$ postoji standardni bazis $\{|\ km\lambda\ \rangle \mid \forall k, m, \lambda\}$ za $\hat{\mathbf{K}}$ koji je svojstveni bazis za $\hat{A}$ i to takav da se spektralna forma operatora $\hat{A}$ može pisati u vidu:

$$\hat{A} = \sum_k \sum_\lambda a_{k\lambda} \sum_{m=-k}^{k} |\ km\lambda\ \rangle\langle km\lambda\ |, \tag{6.4.12c}$$

gde su $a_{k\lambda}$ svojstvene vrednosti operatora $\hat{A}$.

Dokaz: Iz prethodnih razmatranja čitaocu je već jasna ekvivalentnost (6.4.12*a*) i (6.4.12*b*). Da (6.4.12*a*) ima za posledicu (6.4.12*c*) sledi iz načina kako se konstruiše standardni bazis D 6.3.1. Naime, potpuno otvoreni dopunski kvantni broj λ možemo odrediti zahtevom da prebrojava vektore u svojstvenom bazisu operatora $\hat{A}_{k,m=k}$ u koji se redukuje $\hat{A}$ u $\mathcal{V}_{k,m=k}$. Zbog ekvivalentnosti svih $\hat{A}_{km}$, $m = -k, ..., k$ (T 6.4.2) onda sledi (6.4.12*c*) (uporediti S 6.3.2 u pogledu sumiranja po m). S druge strane, ako važi (6.4.12*c*), onda se $\hat{A}$ u svakom $\mathcal{V}_{k\lambda}$ redukuje u konstantu $a_{k\lambda}$ i stoga komutira sa $\hat{\mathbf{K}}_{k\lambda}$. Onda, usled $\mathcal{H} = \oplus_{k\lambda}\mathcal{V}_{k\lambda}$, operatori $\hat{A}$ i $\hat{\mathbf{K}}$ komutiraju u celom $\mathcal{H}$, tj. sledi (6.4.12*a*). *Q. E. D.*

Zadatak 6.4.1 Dokazati sledeće: Ako $\hat{\mathbf{K}}^2$, $\hat{K}_z$ i $\hat{A}$ čine potpun skup kompatibilnih opservabli u $\mathcal{H}$, onda $\lambda \neq \lambda'$ iziskuje $a_{k\lambda} \neq a_{k\lambda'}$, $\forall k$.

***Napomena* 6.4.2** Treba uočiti da je zahtev (6.4.12*a*) jači od zahteva $[\ \hat{A}, \hat{\mathbf{K}}^2\ ] = 0$ i $[\ \hat{A}, \hat{K}_z\ ] = 0$, koji su dovoljni za dopunjavanje $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$ sa $\hat{A}$. Na račun pomenutog jačeg zahteva postižemo da je zajednički svojstveni bazis za $\hat{\mathbf{K}}^2$, $\hat{K}_z$ i $\hat{A}$ standardan za $\hat{\mathbf{K}}$.

6.4.6 * Lie-jeva algebra i grupa

Na kraju ovog odeljka da napomenemo da je dalekosežna paralelnost osobina $\hat{\mathbf{K}}$ i grupe opštih rotacija samo specijalan slučaj paralelnih osobina Lie-jevih algebri i odgovarajućih Lie-jevih grupa.

[6.4.3] Na prvi pogled kao da prećutno pretpostavljamo neprekidnost operatora $\hat{A}$, jer, prema (6.4.1), ako $\hat{A}$ komutira i sa limesom onda iz (6.4.11) sledi komutiranje $[\ \hat{A}, \hat{\mathbf{K}}\ ] = 0$. Međutim, mi u stvari prećutno pretpostavljamo jednu opštiju osobinu za operator $\hat{A}$: tzv. zatvorenost operatora. To po definiciji znači da $x = \lim_{n\to\infty} x_n$ i $y = \lim_{n\to\infty} \hat{A}x_n$ povlače $x \in \mathcal{D}_{\hat{A}}$ (domen od $\hat{A}$) i $\hat{A}x = y$, tj. $\hat{A}\lim_{n\to\infty} x_n = \lim_{n\to\infty} \hat{A}x_n$. Znači, opet imamo komutiranje sa limesom, ali pod uslovom da likovi $\hat{A}x_n$ konvergiraju. Jednakost (6.4.11) je tipa $\hat{B} = \lim_{n\to\infty} \hat{B}_n$ i znamo da $\hat{A}\hat{B}_n = \hat{B}_n\hat{A}$, $\forall n$. Onda takođe $\lim_{n\to\infty} \hat{A}\hat{B}_n = \lim_{n\to\infty} \hat{B}_n\hat{A}$. DS se svodi na $\hat{B}\hat{A}$, a LS usled zatvorenosti operatora $\hat{A}$ daje $\hat{A}\hat{B}$. Stoga $[\ \hat{A}, \hat{B}\ ] = 0$. Za sve operatore koji se koriste u kvantnoj mehanici prećutno se pretpostavlja da imaju osobinu zatvorenosti.

Pošto je u kvantnoj mehanici Lie-jeva algebra u neposrednoj vezi sa opservablama ($\imath\hat{\mathbf{K}}$ obrazuju Lie-jevu algebru u našem slučaju), njenoj prezentaciji se obično daje prioritet, kao što smo i mi učinili. U grupno-teorijskim prilazima često je obratno.

Pomenuli smo pojam Lie-jeve grupe koja "odgovara" jednoj Lie-jevoj algebri. Tu se zapravo radi o tzv. integrabilnoj Lie-jevoj algebri, tj. o algebri sa čijih se elemenata eksponencijalnim funkcijama, kao u stavu S 6.4.1 može preći na elemente Lie-jeve grupe. Postoje i neintegrabilne algebre, ali nisu od značaja za kvantnu mehaniku.

6.5 Sferne koordinate i separacija varijabli

U dorađivanju teorije orbitnog uglovnog momenta jedne kvantne čestice (u odnosu na teoriju opšteg uglovnog momenta) pokazuje se svrsishodnim da se sa Descartes-ovih koordinata pređe na sferne polarne koordinate i da se izvrši odgovarajuća faktorizacija orbitnog prostora stanja čestice.

Zajednički svojstveni problem od $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ (zapravo dorađivanje njegovog rešenja) svešćemo na jednostavne diferencijalne jednačine u faktor prostorima koji odgovaraju pojedinim sfernim polarnim uglovima. Ovaj postupak se naziva separacijom varijabli. Metod separacije varijabli izložićemo u opštoj formi kako bi se njime mogli koristiti i u narednim glavama.

6.5.1 Definicija orbitnog uglovnog momenta jedne kvantne čestice

U (6.2.1) definisali smo orbitni uglovni moment jedne čestice kao vektorski operator

$$\hat{\mathbf{l}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \tag{6.5.1}$$

u orbitnom prostoru jedne čestice $\mathcal{H}_o$, ili detaljnije

$$\hat{l}_x \stackrel{\text{def}}{=} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{l}_y \stackrel{\text{def}}{=} \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{l}_z \stackrel{\text{def}}{=} \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \tag{6.5.2a,b,c}$$

Videli smo u (6.2.2) da komponente vektorskog operatora $\hat{\mathbf{l}}$ zadovoljavaju komutacione relacije

$$[\, \hat{l}_x, \hat{l}_y \,] = \imath\hbar\hat{l}_z, \quad [\, \hat{l}_y, \hat{l}_z \,] = \imath\hbar\hat{l}_x, \quad [\, \hat{l}_z, \hat{l}_x \,] = \imath\hbar\hat{l}_y. \tag{6.5.3}$$

Ekvivalentnim komutacionim relacijama (6.2.7) definisali smo vektorski operator opšteg uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}$, što znači da je $\hat{\mathbf{l}}$ specijalni slučaj $\hat{\mathbf{K}}$. Stoga za $\hat{\mathbf{l}}$ važe svi rezultati iz prethodna tri odeljka, ali neki od njih u specifičnom vidu i sa dodatnim detaljima.

Videli smo u (6.2.5) i (6.2.6) da odnos vektorske opservable $\hat{\mathbf{l}}$ sa osnovnim skupom opservabli $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ u $\mathcal{H}_o$ (uporediti § 2.6.3) može da se izrazi komutacionim relacijama:

$$[\, \hat{l}_q, \hat{q}' \,] = \imath\hbar \sum_{q''=x,y,z} \epsilon_{qq'q''}\hat{q}'', \quad q, q' = x, y, z; \tag{6.5.4}$$

$$[\, \hat{l}_q, \hat{p}_{q'} \,] = \imath\hbar \sum_{q''=x,y,z} \epsilon_{qq'q''}\hat{p}_{q''} \quad q, q' = x, y, z. \tag{6.5.5}$$

Zadatak 6.5.1 Pretpostaviti da su $\hat{\mathbf{l}}$ nepoznati polinomi od $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$. Pokazati pomoću relacija (2.5.11) (prenesenih iz $\mathcal{H}_q$, $q = x, y, z$ u $\mathcal{H}_o$) da iz (6.5.4) i (6.5.5) slede (6.5.2) (a prema tome i (6.5.3)).

Na osnovu iskaza u Zadatku Z 6.5.1, (6.5.4) i (6.5.5) mogu se smatrati definicijom $\hat{\mathbf{l}}$ u $\mathcal{H}_o$. To su komutacione relacije i stoga imaju najpogodniju formu za kvantno-mehanički formalizam.

6.5.2 Sferne polarne koordinate

Da bismo dobili što jednostavniju formu operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$, koji, kao što smo videli, igraju osnovnu ulogu u teoriji uglovnog momenta $\hat{\mathbf{l}}$, uvodimo *sferne polarne koordinate* r, θ, ϕ za tačke prostora (videti Crtež C 6.4):

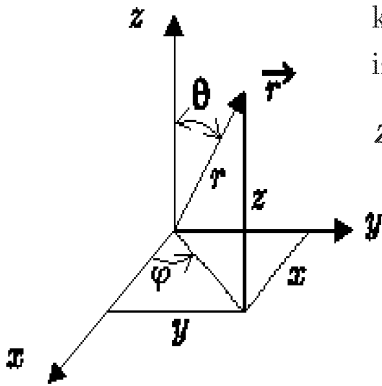
$$x = r\sin\theta\cos\phi, \quad y = r\sin\theta\sin\phi, \quad z = r\cos\theta; \tag{6.5.6}$$

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}, \quad \cos\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}, \quad \operatorname{tg}\phi = \frac{y}{x}; \tag{6.5.7}$$

$$0 \le r < \infty, \quad 0 \le \theta \le \pi, \quad 0 \le \phi < 2\pi. \tag{6.5.8}$$

Od sfernih polarnih koordinata r se naziva poluprečnikom, θ uglom širine, a ϕ azimutalnim uglom, azimutom ili uglom dužine.

Da bismo izračunali kako glase operatori $\hat{\mathbf{l}}$ u sfernim polarnim koordinatama, potrebne su nam pored relacija (6.5.6) i relacije koje izražavaju $\nabla \stackrel{\text{def}}{=} \{\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\}$ pomoću $\frac{\partial}{\partial r}$, $\frac{\partial}{\partial \theta}$ i $\frac{\partial}{\partial \phi}$.



Slika 6.4: **Sferne polarne koordinate.**

Zadatak 6.5.2 Dokazati sledeće relacije

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi, \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta, \tag{6.5.9a,b,c}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi, \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{1}{r}\sin\theta, \tag{6.5.10a,b,c}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0. \tag{6.5.11a,b,c}$$

Iz relacija (6.5.9), (6.5.10) i (6.5.11) odmah sledi

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{6.5.12a}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{6.5.12b}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}. \tag{6.5.12c}$$

Zadatak 6.5.3 Pokazati da operatori $\hat{\mathbf{l}}$ u sfernim polarnim koordinatama imaju sledeći vid

$$\boxed{\hat{l}_z = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}}, \quad \hat{l}_x = \imath\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}), \quad \hat{l}_y = -\imath\hbar(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}). \tag{6.5.13a,b,c}$$

Zadatak 6.5.4 Pokazati da operatori $\hat{l}_\pm$ i $\hat{\mathbf{l}}^2$ u sfernim polarnim koordinatama glase:

$$\hat{l}_+ \stackrel{\text{def}}{=} \hat{l}_x + \imath \hat{l}_y = \hbar e^{\imath\varphi}(\frac{\partial}{\partial\theta} + \imath \text{ctg}\,\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}), \quad \hat{l}_- \stackrel{\text{def}}{=} \hat{l}_x - \imath \hat{l}_y = \hbar e^{-\imath\varphi}(-\frac{\partial}{\partial\theta} + \imath \text{ctg}\,\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}), \tag{6.5.14a,b}$$

$$\boxed{\hat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}) \right)}. \tag{6.5.15}$$

Iz jednakosti (6.5.13), (6.5.14) i (6.5.15) vidimo da nijedan od operatora koji nas sad zanimaju ne dejstvuje na poluprečnik r (kao nezavisno promenljivu), a $\hat{l}_z$ čak deluje samo na azimutalni ugao φ. Izgleda svrsishodno razdvojiti promenljive r, θ i φ.

I ovom zadatku prići ćemo deduktivno, polazeći od faktorizacije prostora stanja.

6.5.3 Faktor prostori stanja pojedinih sfernih polarnih koordinata

Pređimo sa apstraktnog orbitnog prostora stanja $\mathcal{H}_o$ na prostor koordinatne reprezentacije $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$, tj. pišimo vektore stanja čestice u vidu $\psi(x,y,z), \phi(x,y,z) \in \mathcal{L}^2(\mathbf{r})$, itd.

Skalarni proizvod u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ može da se izrazi i preko sfernih polarnih koordinata:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,y,z)\phi(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \tag{6.5.16}$$

$$\int_0^\infty r^2\,\mathrm{d}r \int_0^\pi \sin\theta\,\mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi\, \psi^*(x(r,\theta,\varphi), y(r,\theta,\varphi), z(r,\theta,\varphi))\phi(x(r,\theta,\varphi), y(r,\theta,\varphi), z(r,\theta,\varphi)).$$

Daćemo bez dokaza sledeći stav:

Stav 6.5.1 *a) Neka je $\mathcal{L}^2(r)$ skup svih kompleksnih funkcija $f(r)$ za koje je $\int_0^\infty |f(r)|^2 r^2 dr \le \infty$, neka je $\mathcal{L}^2(\theta)$ prostor svih kompleksnih funkcija $g(\theta)$ koje zadovoljavaju $\int_0^\pi |g(\theta)|^2 \sin\theta d\theta \le \infty$ i, najzad, neka $\mathcal{L}^2(\varphi)$ označava skup svih kompleksnih funkcija $h(\varphi)$ takvih da je $\int_0^{2\pi} |h(\varphi)|^2 d\varphi \le \infty$. Svaki od navedenih skupova predstavlja prebrojivo-beskonačno-dimenzionalan* Hilbert-ov prostor. *Linearne kombinacije se formiraju na uobičajeni način, a skalarni proizvod*[6.5.1] *je dat sa*

$$(f_1(r), f_2(r)) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\infty f_1^*(r) f_2(r) r^2\,\mathrm{d}r \quad u\ \mathcal{L}^2(r), \tag{6.5.17a}$$

$$(g_1(\theta), g_2(\theta)) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\pi g_1^*(\theta) g_2(\theta) \sin\theta d\theta \quad u\ \mathcal{L}^2(\theta), \tag{6.5.17b}$$

$$(h_1(\varphi), h_2(\varphi)) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{2\pi} h_1^*(\varphi) h_2(\varphi) d\varphi \quad u\ \mathcal{L}^2(\varphi). \tag{6.5.17c}$$

b) Običnim množenjem funkcija $f(r)g(\theta)h(\varphi)$, i to po jedne funkcije iz $\mathcal{L}^2(r)$, $\mathcal{L}^2(\theta)$ i $\mathcal{L}^2(\varphi)$ ostvaruje se direktni proizvod

$$\boxed{\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi) = \mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\theta) \otimes \mathcal{L}^2(\varphi)}, \tag{6.5.18}$$

[6.5.1] U svim Hilbert-ovim prostorima koji se sastoje od funkcija, kao što su $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$, $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi)$ ili direktni faktori $\mathcal{L}^2(q)$ $(q = x,y,z)$, $\mathcal{L}^2(r)$, $\mathcal{L}^2(\theta)$, $\mathcal{L}^2(\varphi)$, u rigoroznom prilazu (u funkcionalnoj analizi) u stvari se Riemann-ov (tj. obični) integral zamenjuje Lebesgue-ovim (Lebegovim) integralom, koji je zasnovan na Lebesgue-ovoj meri. Slovo $\mathcal{L}$ u označavanju tih prostora je početno slovo od "Lebesgue".

gde je $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi)$ prebrojivo beskonačno dimenzionalni Hilbert-ov prostor svih kompleksnih funkcija $\chi(r,\theta,\varphi)$ za koje je $\int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\,|\chi(r,\theta,\varphi)|^2<\infty$.

6.5.4 Matematički podsetnik — direktni proizvod operatora i svojstveni problem

Neka je direktni proizvod Hilbert-ovih prostora $\mathcal{H}=\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ ostvaren pomoću preslikavanja $\{\phi_1,\phi_2\}\to\phi_1\otimes\phi_2\in\mathcal{H}$, gde je $\{\phi_1,\phi_2\}$ par vektora $\phi_1\in\mathcal{H}_1$, $\phi_2\in\mathcal{H}_2$. Neka je $\hat{A}_1$ operator definisan u $\mathcal{H}_1$, a $\hat{A}_2$ operator u $\mathcal{H}_2$. U kompozitnom prostoru $\mathcal{H}$ možemo uzeti, kao što smo podsetili u § 2.6.4, njihov direktni proizvod $\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2$, čije je delovanje na nekorelisane vektore u $\mathcal{H}$ definisano sa

$$(\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2)(\phi_1\otimes\phi_2)\stackrel{\text{def}}{=}(\hat{A}_1\phi_1)\otimes(\hat{A}_2\phi_2). \tag{6.5.19}$$

Operator vida $\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2$ naziva se nekorelisanim operatorom u kompozitnom prostoru $\mathcal{H}$. Iz (6.5.19) neposredno sledi:

$$(\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2)(\hat{B}_1\otimes\hat{B}_2)=(\hat{A}_1\hat{B}_1)\otimes(\hat{A}_2\hat{B}_2) \tag{6.5.20}$$

i

$$\left(\sum_{k=1}^{K}\lambda_k\hat{A}_1^{(k)}\right)\otimes\left(\sum_{q=1}^{Q}\mu_q\hat{A}_2^{(q)}\right)=\sum_{k=1}^{K}\sum_{q=1}^{Q}\lambda_k\mu_q\hat{A}_1^{(k)}\otimes\hat{A}_2^{(q)}, \tag{6.5.21}$$

gde su λ_k i μ_q kompleksni brojevi. Takođe važe relacije $(\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2)^\dagger=\hat{A}_1^\dagger\otimes\hat{A}_2^\dagger$ i, ako su oba nesingularna, $(\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2)^{-1}=\hat{A}_1^{-1}\otimes\hat{A}_2^{-1}$. Kao posledica toga, ako su $\hat{A}_1$ i $\hat{A}_2$ hermitski operatori, onda je i $\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2$ hermitski; ako su $\hat{A}_1$ i $\hat{A}_2$ unitarni operatori, onda je i $\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2$ unitarni operator.

Rešenje svojstvenog problema hermitskog operatora $\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2$ dobija se "direktnim množenjem" rešenja svojstvenog problema za $\hat{A}_1$ i rešenja svojstvenog problema za $\hat{A}_2$. Naime, ako su

$$\hat{A}_1\phi_1=a_1\phi_1,\quad \hat{A}_2\phi_2=a_2\phi_2 \tag{6.5.22a,b}$$

rešenja pomenutih svojstvenih problema, onda imamo

$$(\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2)(\phi_1\otimes\phi_2)=a_1a_2(\phi_1\otimes\phi_2) \tag{6.5.22c}$$

kao rešenje svojstvenog problema za $\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2$.

Što se tiče kompletnih rešenja, možemo na sledeći način koncizno formulisati stanje stvari. Pretpostavimo da $\hat{A}_1$ i $\hat{A}_2$ imaju čisto diskretne spektre i neka je $\{|\,n\nu_n\,\rangle_1\mid\forall\nu_n,\forall n\}$ svojstveni bazis od $\hat{A}_1$, sa $\{a_n|\forall n\}$ kao spektrom (ν_n prebrojava degenerisana svojstvena stanja uz isto a_n), a neka su $\{|\,m\nu_m\,\rangle_2\mid\forall m,\nu_m\}$ i $\{a_m|\forall m\}$ analogno svojstveni bazis i spektar za $\hat{A}_2$. Onda je $\{|\,n\nu_n\,\rangle_1\otimes|\,m\nu_m\,\rangle_2\mid\forall m,\nu_m,n,\nu_n\}$ svojstveni bazis za operator $\hat{A}_1\otimes\hat{A}_2$, a odgovarajući čisto diskretni spektar je $\{a_na_m|\forall n,m\}$ (pri čemu se može ponoviti ista svojstvena vrednost a_na_m za različite parove indeksa n,m).

Sve što je rečeno neposredno se uopštava na eventualne kontinualne spektre i na direktni proizvod više faktora.

6.5.5 Pojam separacije varijabli

Imajući u vidu direktnu faktorizaciju (6.5.18), $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi) = \mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\theta) \otimes \mathcal{L}^2(\varphi)$, operator $\hat{l}_z = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ iz (6.5.13a) možemo da prepišemo u vidu

$$\hat{l}_z = \hat{I}_r \otimes \hat{I}_\theta \otimes [-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}]_\varphi, \tag{6.5.23}$$

gde indeks (simbolično) pokazuje u kom od faktor prostora je operator definisan, a $\hat{I}_r$ je jedinični operator u $\mathcal{L}^2(r)$ itd.

Naša druga jednakost od najveće važnosti, (6.5.15), očigledno može da se napiše u vidu

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{I}_r \otimes [\frac{1}{\sin^2\theta}]_\theta \otimes [-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}]_\varphi + \hat{I}_r \otimes [-\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}]_\theta \otimes \hat{I}_\varphi. \tag{6.5.24}$$

Dakle, $\hat{l}_z$ je nekorelisan operator u $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi)$, a $\hat{\mathbf{l}}^2$ je zbir dva nekorelisana operatora. Naš je cilj da kompletno rešimo zajednički svojstveni problem za kompatibilne opservable $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ (delimično rešenje smo postigli u opštoj teoriji).

Pitamo se da li je oblik (6.5.24) još uvek dovoljno prost da možemo svojstveni problem rešavati u pojedinim faktor prostorima kao u slučaju nekorelisanih operatora. Videćemo u sledećem paragrafu da dotični postupak postoji i naziva se *separacijom varijabli* (jer varijable r, θ i φ definišu pojedine faktor prostore $\mathcal{L}^2(r)$, $\mathcal{L}^2(\theta)$ i $\mathcal{L}^2(\varphi)$).

6.5.6 Teoremi o separaciji varijabli

Na pitanje sa kraja prethodnog paragrafa možemo dati precizan potvrdan odgovor u vidu sledeća dva teorema:

Teorem 6.5.1 *Neka je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ i neka je $\hat{A}$ hermitski operator u $\mathcal{H}$ dat u vidu zbira dva nekorelisana operatora sa hermitskim faktorima*

$$\boxed{\hat{A} = \hat{B}_1 \otimes \hat{C}_2 + \hat{B}'_1 \otimes \hat{C}'_2}, \tag{6.5.25}$$

a da su pri tome dva druga faktora (operatori u $\mathcal{H}_2$) $\hat{C}_2$ i $\hat{C}'_2$ kompatibilne *opservable. Onda rešenje svojstvenog problema opservable $\hat{A}$ u $\mathcal{H}$ možemo dobiti u dva koraka:*

a) nađemo bilo koje rešenje zajedničkog svojstvenog problema opservabli $\hat{C}_2$ i $\hat{C}'_2$ u $\mathcal{H}_2$:

$$\boxed{\hat{C}_2\chi^{(n_1,n_2)} = c_{n_1}\chi^{(n_1,n_2)}, \quad \hat{C}'_2\chi^{(n_1,n_2)} = c_{n_2}\chi^{(n_1,n_2)}}; \tag{6.5.26}$$

b) formiramo pomoćni hermitski operator $c_{n_1}\hat{B}_1 + c_{n_2}\hat{B}'_1$ u $\mathcal{H}_1$ i nađemo bilo koje rešenje njegovog svojstvenog problema:

$$\boxed{(c_{n_1}\hat{B}_1 + c_{n_2}\hat{B}_2)\varphi_1^{(m)} = b_m\varphi_1^{(m)}}. \tag{6.5.27}$$

Onda smo dobili rešenje svojstvenog problema operatora $\hat{A}$:

$$\boxed{\hat{A}(\varphi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)}) = b_m(\varphi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)})}, \tag{6.5.28}$$

pri čemu treći kvantni broj zavisi od prva dva

$$m = m(n_1, n_2) \tag{6.5.29}$$

preko c_{n_1} i c_{n_2} u (6.5.27). Ali zafiksirane vrednosti n_1 i n_2, m uzima vrednosti iz određenog skupa što odgovara spektru operatora u (6.5.27).

Dokaz: LS od (6.5.28) pomoću (6.5.25) postaje $(\hat{B}_1 \otimes \hat{C}_2 + \hat{B}'_1 \otimes \hat{C}'_2)(\varphi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)})$. Služeći se formulom (6.5.27) i uzimajući u obzir (6.5.26), ovaj izraz možemo da prepišemo kao

$$c_{n_1}(\hat{B}_1\varphi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)}) + c_{n_2}(\hat{B}'_1\varphi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)}) = ((c_{n_1}\hat{B}_1 + c_{n_2}\hat{B}'_1)\varphi_1^{(m)}) \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)}.$$

Koristeći (6.5.27), konačno dolazimo do $b_m(\varphi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)})$. *Q. E. D.*

Kao i skoro svugde u ovom udžbeniku, kad se radi o direktnom proizvodu prostora stanja, indeks na operatoru i vektoru podseća na faktor prostor u kome su definisani (to ne važi za svojstvene vrednosti, one su brojevi).

Pažljivi čitalac je zapazio da je pomoćni operator u (6.5.27) formiran na osnovu jednog datog rešenja zajedničkog svojstvenog problema (6.5.26) i stoga je ceo svojstveni problem (6.5.27) u funkciji tog rešenja, otud (6.5.29).

Nameće se pitanje da li su rešenja (6.5.29) svojstvenog problema (6.5.28) izuzetak ili pravilo; preciznije: da li se algoritmom Teorema T 6.5.1 može dobiti svojstveni bazis opservable $\hat{A}$ u kompozitnom prostoru stanja $\mathcal{H}$.

I na ovo pitanje odgovor je potvrdan. Formulisaćemo ga u vidu novog teorema (koji ćemo dokazati u Dodatku § 6.5.10).

Teorem 6.5.2 *Ako kompatibilne opservable $\hat{C}_2$ i $\hat{C}'_2$ u $\mathcal{H}_2$ čine kompletan skup opservabli i ako je svaki pomoćni operator $c_{n_1}\hat{B}_1 + c_{n_2}\hat{B}'_1$ u $\mathcal{H}_1$ kompletna opservabla, onda je $\{\phi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)} | \forall m, n_1, n_2\}$ svojstveni bazis opservable $\hat{A}$ u $\mathcal{H}$, a njen spektar je: $\{b_m | \forall m, n_1, n_2\}$.*

Ako $\hat{C}_2$ i $\hat{C}'_2$ čine nekompletan skup opservabli u $\mathcal{H}_2$ i/ili ako je neki od pomoćnih operatora $c_{n_1}\hat{B}_1 + c_{n_2}\hat{B}'_1$ nekompletna opservabla u $\mathcal{H}_1$ onda za svaku degenerisanu svojstvenu vrednost moramo uvesti poseban indeks koji prebrojava ortonormirane svojstvene vektore koji odgovaraju istoj svojstvenoj vrednosti. Na taj način čitalac može sam da uopšti Teorem T 6.5.2 po potrebi.

Takođe prepuštamo čitaocu da po potrebi uopšti Teoreme T 6.5.1 i T 6.5.2 da obuhvate i eventualne kontinualne spektre. Onda se pojavljuje neprekidni kvantni broj koji prebrojava uopštene svojstvene vektore, ali vid iskaza i rezonovanje ostaju potpuno isti.

Teoremi T 6.5.1 i T 6.5.2 se takođe neposredno uopštavaju na slučaj opservable u kompozitnom prostoru koja se sastoji od zbira K ($K \doteq 3, 4, ...$) direktnih proizvoda hermitskih operatora iz dva faktor prostora, ali tako da K drugih faktora $\hat{C}_2^{(1)}, \hat{C}_2^{(2)}, ..., \hat{C}_2^{(K)}$ uzajamno komutiraju.

6.5.7 Uglovni faktor prostor

Vratimo se sad našem zajedničkom svojstvenom problemu kompatibilnih opservabli $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$. Imajući u vidu forme (6.5.24) i (6.5.23) ovih operatora, pre svega se moramo uveriti da su direktni faktori

$$[-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}]_\varphi, \quad [\frac{1}{\sin^2\theta}]_\theta, \quad [-\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}]_\theta \qquad (6.5.30a,b,c)$$

hermitski operatori. (Što se tiče operatora $[-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}]_\varphi$ u (6.5.24), on je kvadrat operatora u (6.5.30a)).

Zadatak 6.5.5 Dokazati da su operatori (6.5.30) hermitski (u $\mathcal{L}^2(\varphi)$ odnosno u $\mathcal{L}^2(\theta)$) kada se pogodno definišu domeni. (Indikacija: za (6.5.30c) smenom $\cos\theta = x$ dovesti operator na oblik $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.)

Pada u oči da izrazi (6.5.23) i (6.5.24) pokazuju da $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ deluju trivijalno (tj. kao identični operator $\hat{I}_r$) u $\mathcal{L}^2(r)$. Stoga je korisno pre svega razdvojiti $\mathcal{L}^2(r)$ s jedne strane i $\mathcal{L}^2(\theta)$, $\mathcal{L}^2(\varphi)$ s druge.

Definišimo tzv. *uglovni faktor prostor* $\mathcal{L}^2(\Omega)$, koji odgovara uglovima $\Omega \stackrel{\text{def}}{=} \theta, \varphi$ kao

$$\boxed{\mathcal{L}^2(\Omega) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}^2(\theta) \otimes \mathcal{L}^2(\varphi)}, \qquad (6.5.31)$$

tj. kao skup svih komleksnih funkcija $v(\Omega)$ koje su po modulu kvadratno integrabilne:

$$\int |v(\Omega)|^2 \,\mathrm{d}\Omega \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\pi \sin\theta\,\mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi\,|v(\theta,\varphi)|^2 < \infty. \qquad (6.5.32)$$

Sad (6.5.18) možemo da prepišemo u vidu

$$\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi) = \mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\Omega), \qquad (6.5.33)$$

pri čemu opet imamo $f(r) \otimes v(\Omega) \stackrel{\text{def}}{=} f(r)v(\Omega)$, tj. direktni proizvod se opet realizuje običnim množenjem funkcija[6.5.2].

Pošto smo uveli $\mathcal{L}^2(\Omega)$, možemo sad (6.5.23) da zamislimo u vidu

$$\hat{l}_z = \hat{I}_r \otimes [\hat{l}_z]_\Omega, \quad [\hat{l}_z]_\Omega \stackrel{\text{def}}{=} \hat{I}_\theta \otimes [-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}]_\varphi, \qquad (6.5.34)$$

a (6.5.24) u obliku

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{I}_r \otimes \hat{\mathbf{l}}^2_\Omega \qquad (6.5.35a)$$

$$\hat{\mathbf{l}}^2_\Omega \stackrel{\text{def}}{=} [\frac{1}{\sin^2\theta}]_\theta \otimes [-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}]_\varphi + [-\hbar^2\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}]_\theta \otimes \hat{I}_\varphi. \qquad (6.5.35b)$$

[6.5.2]Pre svega i za $\mathcal{L}^2(\Omega)$ važi fusnota 6.5.1. Drugo, prelaskom sa (6.5.18) na (6.5.33), koristimo se asocijativnošću direktnog proizvoda Hilbert-ovih prostora, tj. činjenicom da, ako imamo više množenja $\otimes$, nije važno koje ćemo množenje prvo izvršiti itd. Treće, reformulisavši $\mathcal{L}^2(\Omega)$ od (6.5.31) na skup funkcija $v(\Omega)$ za koje važi (6.5.32), mi smo faktički koristili analogon Stava iz § 6.5.3.

6.5.8 Svojstveni problem od $\hat{l}_z$

Što se tiče svojstvenog problema operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$, imajući u vidu Teoreme T 6.5.1 i T 6.5.2, odmah zaključujemo da moramo prvo potpuno da rešimo svojstveni problem od $-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}$ u $\mathcal{L}^2(\varphi)$ (jer ovaj operator i $\hat{l}_\varphi$ su $\hat{C}_2$ i $\hat{C}'_2$). Za zajednički svojstveni problem od $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ relevantno je da je $-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}$ kvadrat od $-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$; tako u stvari moramo započeti sa nalaženjem potpunog rešenja svojstvenog problema od $-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$, jer se na to svodi zajednički svojstveni problem od $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ u prvom koraku. Dakle, tražimo rešenja za

$$-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}h(\varphi)=m\hbar h(\varphi) \tag{6.5.36}$$

(na osnovu (6.2.21c) pišemo svojstvene vrednosti od $\hat{l}_z$ u vidu $m\hbar$, a iz (6.2.31) znamo već da je m ceo ili poluceo broj). Očigledno je da $h(\varphi)$ mora biti

$$h(\varphi)=Ce^{\imath m\varphi}, \tag{6.5.37}$$

gde je C konstanta normiranja.

Videli smo pri rešavanju Zadatka Z 6.5.5 da je operator $-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$ hermitski u $\mathcal{L}^2(\varphi)$ ako i samo ako za funkcije iz njegovog domena važi granični uslov[6.5.3] (definicija domena):

$$h(2\pi)=h(0). \tag{6.5.38}$$

Granični uslov (6.5.38) se može učiniti plauzibilnim ukazujući na činjenicu da je $-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$ diferencijalni operator, prema tome može da deluje samo na diferencijabilne (pa stoga i u svakoj tački neprekidne) funkcije $h(\varphi)$. A $\varphi=0$ i $\varphi=2\pi$ se odnose na istu tačku u prostoru i (6.5.38) zahteva neprekidnost i u toj tački.

Iz (6.5.38) i (6.5.37) se odmah vidi da magnetni kvantni broj m mora biti *ceo broj* (pozitivan, negativan ili nula).

U funkcionalnoj analizi je poznato[6.5.4] da je $\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\imath m\varphi},\ m=0,\pm1,\pm2...\}$ bazis u $\mathcal{L}^2(\varphi)$. Znači da operator $-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$ ima *čisto diskretan i prost spektar* u $\mathcal{L}^2(\varphi)$. A operator $\hat{l}_z$ ima u $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi)$ isti čisto diskretan spektar $\{0,\pm\hbar,\pm2\hbar,...\}$, ali je svaka svojstvena vrednost $m\hbar$ prebrojivo-beskonačno degenerisana.

6.5.9 Svojstveni problem od $\hat{\mathbf{l}}^2$ — početak

Na osnovu Teorema T 6.5.1 u sledećem koraku rešavamo u $\mathcal{L}^2(\theta)$ svojstveni problem pomoćnog operatora $c_{n_1}\hat{B}_1+c_{n_2}\hat{B}'_1$ iz (6.5.27), a iz (6.5.35b) sledi da svojstveni problem ovog operatora

[6.5.3] U nekim udžbenicima kvantne mehanike dozvoljava se da φ uzima sve realne vrednosti i umesto (6.5.38) zahteva se periodičnost funkcije (6.5.37) sa periodom 2π obrazlažući to fizičkom neophodnošću jednoznačnosti talasne funkcije čestice: $f(r)g(\theta)e^{\imath m\varphi}$. U našem prilazu domen od φ je ograničen na interval $[0,2\pi)$ i (6.5.38) postiže jednoznačnost u tački 0. Pošto je Descartes-ov koordinatni sistem, za koji sve vreme prećutno pretpostavljamo da je fiksiran, proizvoljne orijentacije, za bilo koju vrednost azimutnog ugla φ možemo postići da je $\varphi=0$ u (oko z-ose zarotiranom) koordinatnom sistemu. Imajući to u vidu, (6.5.38) u stvari postiže jednoznačnost u celom prostoru.

[6.5.4] Videti, na primer, udžbenik: А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин, *Элементы теории функций и функционального анализа*, Наука, Москва, 1972.

glasi

$$(\frac{m^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta})g(\theta) = l(l+1)g(\theta), \tag{6.5.39}$$

gde smo skratili $\hbar^2$. (U stvari se radi o familiji pomoćnih operatora, njih prebrojava $m^2 = 0, 1, 4, 9, ...$) Svojstvenu vrednost b_m iz (6.5.27) pišemo kao $l(l+1)\hbar^2$, kao što smo to činili i u (6.2.21a) za $\hat{\mathbf{K}}^2$.

Na osnovu rezultata iz § 6.2 znamo da kvantni broj orbitnog uglovnog momenta l ima istu celobrojnost kao njegov magnetni kvantni broj m, tj. l je nužno *ceo broj*.

Nije još jasno koji se celi brojevi pojavljuju u $\mathcal{L}^2(\theta)$ kao l, sa kojom degeneracijom, kako glase odgovarajući svojstveni vektori (i da li $\hat{\mathbf{l}}^2$ ima kontinualni spektar).

Potpuni odgovor na ova pitanja dobićemo u sledećem odeljku.

6.5.10 * Dodatak — dokaz Teorema 2

Ortonormiranost vektora u skupu $\{\phi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)} | \forall m, n_1, n_2\}$ sledi iz (2.6.5b):

$$(\phi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)}, \phi_1^{(m')} \otimes \chi_2^{(n_1',n_2')}) = (\phi_1^{(m)}, \phi_1^{(m')})_1 (\chi_2^{(n_1,n_2)}, \chi_2^{(n_1',n_2')})_2 = \delta_{mm'}\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}.$$

Bazis u $\mathcal{H}_1$, npr. $\{\phi_1^{(m_{n^1n^2})} | \forall m_{n^1n^2}\}$, gde je (n^1, n^2) fiksirani par iz skupa $\{(n_1, n_2)\}$, i bazis u $\mathcal{H}_2$, npr. $\{\chi_2^{(n_1,n_2)} | \forall n_1, n_2\}$ direktnim množenjem daju bazis u $\mathcal{H}$ (uporediti iznad (2.6.7)). Prema tome, dovoljno je da dokažemo da se svaki vektor $\phi_1^{(m_{n^1n^2})} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)}$ može razviti po našem skupu $\{\phi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)} | \forall n_1, n_2, m(n_1, n_2)\}$ (onda se sigurno i svaki vektor iz $\mathcal{H}$ može razviti po tom skupu).

Možemo razviti $\phi_1^{(m_{n^1n^2})} = \sum_m f_m \phi_1^{(m)}$ za bilo koji par indeksa (n_1, n_2) (a $m = m(n_1, n_2)$), pošto je $\{\phi_1^{(m)} | \forall m\}$ bazis u $\mathcal{H}_1$. Posledica toga je razvijanje $\phi_1^{(m_{n^1n^2})} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)} = \sum_m f_m \phi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)}$ gde je na DS-i $m = m(n_1, n_2)$, a (n_1, n_2) je, naravno, isto na obema stranama jednakosti. Dakle, ortonormirani skup vektora $\{\phi_1^{(m)} \otimes \chi_2^{(n_1,n_2)} | \forall n_1, n_2, m\}$ jeste kompletan u kompozitnom prostoru $\mathcal{H}$.

Skup svojstvenih vrednosti $\{b_m | \forall m, n_1, n_2\}$ svakako pripada spektru od $\hat{A}$. Treba da dokažemo da je to kompletan spektar. Pretpostavimo, *ab contrario*, da $\hat{A}$ ima još neku svojstvenu vrednost (diskretnu ili neprekidnu). Onda bi odgovarajući svojstveni vektor (pravi ili uopšteni) morao biti ortogonalan na pomenuti svojstveni bazis. A zbog kompletnosti tog bazisa samo je nulti vektor ortogonalan na njega. Dakle, ne može da postoji još neki element spektra, tj. $\{b_m | \forall n_1, n_2, m\}$ je ceo spektar od $\hat{A}$.

Čitalac je verovatno zapazio da argumentacija poslednjeg pasusa u stvari dokazuje opšti iskaz: kad god neka opservabla ima svojstveni bazis, onda ima čisto diskretan spektar, koji se sastoji upravo od svojstvenih vrednosti koje odgovaraju vektorima bazisa.

6.6 Sferni harmonici kao standardni bazis

U ovom odeljku ćemo kompletirati kvantnu teoriju orbitnog uglovnog momenta. Definisaćemo tzv. sferne harmonike, koji čine jedan standardan bazis za $\hat{\mathbf{l}}$. Kao primenu sfernih harmonika, izvešćemo jednu potpunu klasifikaciju stanja za slobodnu česticu. Ona će biti data u vidu tzv.

sfernih talasa, koji čine alternativu u odnosu na ravne talase proučene ranije. Nabacićemo ideju sferno polarne koordinatne reprezentacije. Završićemo odeljak sa kratkom diskusijom ireducibilnih potprostora za $\hat{\mathrm{l}}$.

6.6.1 Svojstveni problem od $\hat{\mathrm{l}}^2$ — nastavak

U prethodnom odeljku stigli smo do sledeće familije pomoćnih svojstvenih problema (videti (6.5.39):

$$[\frac{m^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}]g_l^m(\theta) = l(l+1)g_l^m(\theta), \quad m^2 = 0, 1, 4, 9, ... \tag{6.6.1}$$

Zamenom $\cos\theta = x$ (stoga $-\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = \mathrm{d}x$ i $-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$) gornji izraz prelazi u

$$[\frac{m^2}{(1-x^2)} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}]g_l^m(x) = l(l+1)g_l^m(x), \quad m^2 = 0, 1, 4, 9, ... \tag{6.6.2}$$

(mogli smo uvesti $\tilde{g}(x) \stackrel{\mathrm{def}}{=} g(\theta(x))$; pišemo $g(x)$ umesto $\tilde{g}(x)$).

6.6.2 Matematički podsetnik — asocirane Legendre-ove funkcije

U teoriji diferencijalnih jednačina poznato je da tzv. *Legendre-ova* (čitati: Ležandrova) *diferencijalna jednačina*

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}g(x) = l(l+1)g(x), \tag{6.6.3}$$

a to je (6.6.2) sa $m^2 = 0$, ima za rešenja tzv. *Legendre-ove polinome* $P_l(x)$:

$$P_l(x) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}(x^2-1)^l \quad l = 0, 1, 2... \tag{6.6.4a}$$

$(-1 \leq x \leq +1)$. Konstanta u (6.6.4a) izabrana je tako da se dobije

$$P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l. \tag{6.6.4b}$$

Opšti slučaj (6.6.2) sa $m^2 = 0, 1, 4, ...$ ima za rešenja tzv. *asocirane Legendre-ove funkcije*:

$$\begin{aligned} P_l^{|m|}(x) \stackrel{\mathrm{def}}{=} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{\mathrm{d}^{|m|}P_l(x)}{\mathrm{d}x^{|m|}} \quad &= \quad (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{\mathrm{d}x^{l+|m|}}(x^2-1)^l, \\ |m| = 0, 1, 2, ..., \qquad & \qquad l = |m|, |m|+1, |m|+2, ..., \end{aligned} \tag{6.6.5a}$$

gde je $\frac{\mathrm{d}^0}{\mathrm{d}x^0} \stackrel{\mathrm{def}}{=} 1$.

Treba zapaziti da dve vrednosti magnetnog kvantnog broja koje se razlikuju samo za predznak imaju isto m^2 u (6.6.2) i iste $|m|$, tj. daju iste asocirane Legendre-ove funkcije. Treba takođe uočiti da su Legendre-ovi polinomi specijalni slučaj asociranih Legendre-ovih funkcija za $m = 0$.

Iz (6.6.5a) i (6.6.4b) sledi

$$P_l^{|m|}(x = \pm 1) = (\pm 1)^l \delta_{m0}. \tag{6.6.5b}$$

$P_l^{|m|}(x)$ se ponekad preciznije nazivaju i asocirane Legendre-ove funkcije prve vrste, za razliku od istoimenih funkcija druge vrste, koje su singularne i iz fizičkih razloga neprihvatljive za kvantnu mehaniku (ne daju talasne funkcije konačne norme).

Za fiksirano m, funkcije $P_l^{|m|}(x)$ zadovoljavaju

$$\int_{-1}^{+1} P_l^{|m|}(x) P_{l'}^{|m|}(x)\, \mathrm{d}x = \delta_{ll'} \frac{2}{2l+1} \cdot \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}. \tag{6.6.6}$$

Pošto su $P_l^{|m|}(x)$ realne funkcije, iz (6.6.6) vidimo da su one ortogonalni vektori u $\mathcal{L}^2(\theta)$ (jer $x = \cos\theta$). Štaviše, ispostavlja se da je za svako m, $\{P_l^{|m|}(x)|l = |m|, |m|+1, ...\}$ *bazis* u $\mathcal{L}^2(\theta)$ (za $|m| \neq |m'|$, $P_l^{|m|}(x)$ i $P_{l'}^{|m'|}(x)$ ne moraju biti ortogonalni vektori u $\mathcal{L}^2(\theta)$).

6.6.3 Sferni harmonici

Dakle, podsetivši se na rešenja diferencijalnih jednačina na koje se svode pomoćni svojstveni problemi (6.6.1), možemo zaključiti, u smislu Teorema T 6.5.1, da $[\hat{l}_z]_\Omega$ i $\hat{\mathbf{l}}^2_\Omega$ imaju zajednički svojstveni bazis

$$\{C_{ml} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{\imath m\varphi} | l = |m|, |m|+1, ...; m = 0, \pm 1, \pm 2, ...\}$$

(gde su C_{ml} konstante normalizacije) sa odgovarajućim čisto diskretnin spektrima: $\{m\hbar | m = 0, \pm 1, ...\}$ od $[\hat{l}_z]_\Omega$ i $\{l(l+1)\hbar^2 | l = 0, 1, 2, ...\}$ od $\hat{\mathbf{l}}^2_\Omega$.

Obratiti pažnju na to da pri rešavanju svojstvenog problema od $\hat{\mathbf{l}}^2_\Omega$ imamo sledeće specijalne slučajeve (u odnosu na opštu teoriju T 6.5.1,T 6.5.2): kvantni brojevi $\{n_1, n_2\}$ svode se na jedan magnetni kvantni broj m, kvantni broj l je preuzeo ulogu broja $m = m(n_1, n_2)$ iz opšte teorije (tamo to nije bio magnetni kvantni broj!), a zavisnost m od n_1 i n_2 je u nejednakosti $l \geq |m|$, dok su različite vrednosti $m(n_1, n_2)$ za dato $\{n_1, n_2\}$ date sa $l = |m|, |m|+1, ...$

Zadatak 6.6.1 Pokazati da vektori zajedničkog svojstvenog bazisa od $[\hat{l}_z]_\Omega$ i $\hat{\mathbf{l}}^2_\Omega$ nakon normiranja glase

$$\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{\imath m\varphi},$$

ako se fazni faktori odaberu na najprostiji način.

Takozvani *sferni harmonici*, koji se obeležavaju sa $Y_l^m(\theta, \varphi)$, definišu se za $m < 0$ upravo izrazom iz Zadatka Z 6.6.1, a za $m \geq 0$ tim izrazom pomnoženim sa $(-1)^m$, tj.

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \stackrel{\text{def}}{=} (\text{sign}(m))^m (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{\imath m\varphi}, \quad \forall m, \forall l \tag{6.6.7}$$

(sa sign(x) smo obeležili predznak izraza x).

Zadatak 6.6.2 Kako se na sferne harmonike odražava činjenica da kako $\{\theta, \varphi | \theta = 0,\ 0 \leq \varphi < 2\pi\}$, tako i $\{\theta, \varphi | \theta = \pi,\ 0 \leq \varphi < 2\pi\}$, određuju po jednu tačku na jediničnoj sferi?

Zadatak 6.6.3 Izvesti sledeće specijalne slučajeve od (6.6.7):

$$Y_{l=0}^{m=0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \tag{6.6.8}$$

$$Y_{l=1}^{m=0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta, \quad Y_{l=1}^{m=\pm1}(\theta,\varphi) = \pm\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{\pm\imath\varphi}. \tag{6.6.9}$$

Pošto se sferni harmonici mnogo koriste u primenama, navešćemo eksplicitno i ostale Y_l^m do $l = 3$.

$$Y_{l=2}^{m=0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(2\cos^2\theta - \sin^2\theta), \quad Y_{l=2}^{m=\pm1}(\theta,\varphi) = \pm\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm\imath\varphi}. \tag{6.6.10a}$$

$$Y_{l=2}^{m=\pm2}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta e^{\pm2\imath\varphi}, \tag{6.6.10b}$$

$$Y_{l=3}^{m=0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}(2\cos^3\theta - \cos\theta\sin^2\theta), \quad Y_{l=3}^{m=\pm1}(\theta,\varphi) = \pm\frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}}(4\cos^2\theta\sin\theta - \sin^3\theta)e^{\pm\imath\varphi}, \tag{6.6.11a}$$

$$Y_{l=3}^{m=\pm2}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{\pi}}\cos\theta\sin^2\theta e^{\pm2\imath\varphi}, \quad Y_{l=3}^{m=\pm3}(\theta,\varphi) = \pm\frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\sin^3\theta e^{\pm3\imath\varphi}. \tag{6.6.11b}$$

6.6.4 Standardni bazis za $\hat{\mathbf{l}}$

Uprkos opisanom postupku izvođenja Y_l^m, u kom se $[\hat{l}_z]_\Omega$ pojavljivao pre $\hat{\mathbf{l}}_\Omega^2$, konačni rezultat ćemo rezimirati u duhu opšte teorije, kao što je to uobičajeno u kvantnoj mehanici:

– $\hat{\mathbf{l}}_\Omega^2$ i $[\hat{l}_z]_\Omega$, koji u $\mathcal{L}^2(\Omega)$ čine potpun skup kompatibilnih opservabli. Njihov zajednički svojstveni bazis je

$$\{Y_l^m(\theta,\varphi)|m = -l, -l+1, ..., l;\ l = 0, 1, 2, ...\}, \tag{6.6.12}$$

– a odgovarajući parovi respektivnih svojstvenih vrednosti ovih opservabli glase:

$$\{l(l+1)\hbar^2, m\hbar|m = -l, -l+1, ..., l;\ l = 0, 1, 2, ...\}. \tag{6.6.13}$$

Zadatak 6.6.4 Pokazati da se skup parova $\{(m,l)|l = |m|, |m|+1, ...,;\ m = 0, \pm1, \pm2, ...\}$ može obostrano jednoznačnim ceo-na-ceo preslikavanjem prevesti na skup parova $\{(l,m)|m = -l, -l+1, ..., l;\ l = 0, 1, 2, ...\}$. (Indikacija: Napisati (m,l) kao elemente u matrici čije vrste prebrojava l, a kolone m. Zatim zaokrenuti sliku za 90° i pročitati sa nje drugi skup.)

Rezultat (6.6.12),(6.6.13) izražava *kvantizaciju orbitnog uglovnog momenta* proizvoljne čestice i predstavlja jedan od *osnovnih prirodnih zakona kvantne fizike* (a izvodi se, kao što smo videli, iz prvih principa, tj. iz postulata).

Nameću se dva pitanja. Zašto je izbor faznih faktora u definiciji sfernih harmonika baš takav kakav je? S druge strane, pitamo se da li sferni harmonici čine standardan bazis za $\hat{\mathbf{l}}_\Omega$, kao što je prirodno očekivati od krajnjeg rezultata na osnovu opšte teorije.

Odgovor glasi: *sferni harmonici čine standardan bazis* za $\hat{\mathbf{l}}_\Omega$ u $\mathcal{L}^2(\Omega)$ i upravo definicija ovakvog bazisa D 6.3.1, uz ekstra zahtev

$$Y_l^{m=0}(\theta = 0, \varphi = 0) \geq 0, \quad \forall l, \tag{6.6.14}$$

iziskuje izbor faznih faktora kao što je dato u gornjoj definiciji sfernih harmonika. Ovaj iskaz se dokazuje dugačkim računom, pa ćemo dokaz izostaviti.

Što se tiče celog orbitnog prostora stanja čestice, standardni bazis za $\hat{\mathbf{l}}$ u $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi)$ možemo dobiti pomoću proizvoljnog bazisa, recimo $\{f_\lambda(r)|\forall\lambda\}$ u $\mathcal{L}^2(r)$. Naime, $\{f_\lambda(r)Y_l^m(\theta,\varphi)|m = -l, -l+1, ..., l;\ l = 0, 1, ...,\ \forall\lambda\}$ je standardni bazis za $\hat{\mathbf{l}}$. Ovo je primer kako možemo postići realizaciju standardnog bazisa $\{|\,km\lambda\,\rangle|m = -k, -k+1, ..., k;\ \forall k, \forall\lambda\}$ za $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{l}}$ u $\mathcal{H} = \mathcal{H}_o$.

U navedenom bazisu u $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi)$ nemamo korelacije između kvantnih brojeva pomenutih bazisa u $\mathcal{L}^2(r)$ i sfernih harmonika u $\mathcal{L}^2(\Omega)$. Međutim, videćemo već u primeru u sledećem paragrafu da se pojavljuje korelacija u vidu $\lambda = \lambda(l)$.

6.6.5 Slobodna čestica i sferni talasi

U ovom paragrafu izložićemo jedan prilično važan realan fizički primer za upotrebu sfernih harmonika.

Neka je naš fizički sistem *slobodna* trodimenzionalna *čestica*. Njen hamiltonijan glasi $\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$, gde je $\hat{T}$ operator kinetičke energije čestice.

Pređimo sa $\mathcal{H}_o$ na $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$. Pošto je tu $\hat{\mathbf{p}} = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}$ imamo

$$\hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right). \tag{6.6.15}$$

Pređimo dalje sa $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ na $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi)$. Kao što se može naći u priručniku (npr. u fusnoti 6.1.3), laplasijan $\Delta \equiv \nabla^2$ u sfernim polarnim koordinatama glasi

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{6.6.16}$$

Ako se podsetimo vida operatora $\hat{\mathbf{l}}^2$ (6.5.15), možemo to da zamenimo u (6.6.16), a (6.6.16) u (6.6.15) i tako stižemo do

$$\hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2mr^2}. \tag{6.6.17}$$

Jednakost (6.6.17) daje operator kinetičke energije čestice u veoma pogodnoj formi i pojavljivaće se kao sabirak i u hamiltonijanu čestice u spoljašnjem polju (npr. pri izučavanju rotacionog kretanja dvoatomskih molekula; videti § 10.1.5).

Podsetimo se činjenice da, što se tiče faktorizacije $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi) = \mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\Omega)$, $\hat{\mathbf{l}}$ deluje netrivijalno samo u $\mathcal{L}^2(\Omega)$. Pošto prvi sabirak na DS-i od (6.6.17) deluje netrivijalno samo u $\mathcal{L}^2(r)$, vidi se odmah da važi

$$[\,\hat{T}, \hat{\mathbf{l}}^2\,] = 0, \quad [\,\hat{T}, \hat{l}_z\,] = 0, \tag{6.6.18}$$

tj. $\hat{T}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ čine skup kompatibilnih opservabli. (Da li je ovaj skup kompletan ili ne to ne znamo dok ne rešimo zajednički svojstveni problem.)

Primenom metode separacije varijabli (Teoremi T 6.5.1, T 6.5.2) možemo prvo u $\mathcal{L}^2(\Omega)$ poći od sfernih harmonika $Y_l^m(\theta,\varphi)$ kao zajedničkog svojstvenog bazisa za $\hat{l}_\Omega$ i $\hat{\mathbf{l}}^2$ (on je i više, radi jednoznačne definicije, on je standardni bazis za $\hat{\mathbf{l}}_\Omega$), a onda u $\mathcal{L}^2(r)$ rešavati tzv. *radijalni svojstveni problem*:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2})+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2}]f_{lE}(r)=Ef_{lE}(r). \tag{6.6.19}$$

Zadatak 6.6.5 Pokazati da (6.6.19) nakon uvođenja talasnog broja $k\geq 0$ ($k=\frac{p}{\hbar}$, gde je p moduo impulsa slobodne čestice):

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \tag{6.6.20}$$

i smene nezavisno promenljive

$$\rho \stackrel{\mathrm{def}}{=} kr, \tag{6.6.21}$$

radijalna svojstvena jednakost (6.6.19) postaje

$$[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}]f_{lk}(\rho)=0, \tag{6.6.22}$$

gde je $f_{lk}(\rho)\stackrel{\mathrm{def}}{=}f_{lE}(\frac{\rho}{k})$ (dakle, f_{lk} i f_{lE} su nejednake funkcionalne zavisnosti), a k i E su povezani preko (6.6.20).

Jednačina (6.6.22) poznata je u teoriji specijalnih funkcija kao tzv. sferna Bessel-ova diferencijalna jednačina. Traži se rešenje ove jednačine koje je analitičko u celom intervalu $[0,\infty)$ (da bi bilo u domenu operatora $\hat{\mathbf{p}}$ i $\hat{H}=\hat{T}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$).

Kao što je poznato, postoji samo jedno rešenje (6.6.22) koje je, kao što se kaže, regularno u nuli. To je tzv. *sferna Bessel-ova funkcija* $j_l(\rho)$.

Rezimirajući šta smo uradili, možemo reći da smo našli jednu potpunu klasifikaciju stanja (uporediti § 3.2.3) slobodne čestice u vidu tzv. *sfernih talasa* $j_l(kr)Y_l^m(\theta,\varphi)$ (nenormiranih). Oni čine kompletan zajednički svojstveni bazis opservabli $\hat{T}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ i definisani su kao uopšteni vektori ($j_l(kr)\in\mathcal{U}(\mathcal{L}^2(r))$) u $\mathcal{U}(\mathcal{L}^2(\mathbf{r}))$ jednoznačno (s tačnošću do faznog faktora) zahtevom da odgovaraju respektivnim svojstvenim vrednostima: $E=\frac{k^2\hbar^2}{2m}$, $l(l+1)\hbar^2$, $m\hbar$ (i, prema tome, $\hat{T}$, $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$ čine potpun skup!). Sferni talasi predstavljaju i jedan primer standardnog bazisa za $\hat{\mathbf{l}}$ u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$. Pri tome se korelacija pomenuta na kraju prethodnog paragrafa doduše ne ispoljava na svojstvenim vrednostima E (zavise samo od kontinualnog kvantnog broja k), ali je zato očigledno prisutna u odgovarajućim svojstvenim vektorima (jer ovi pored k zavise i od l).

Zadatak 6.6.6 Pokazati da važi vektorska komutaciona relacija jača od (6.6.18) i da iz nje, na osnovu opšte teorije, sledi da energija ne zavisi od magnetnog kvantnog broja.

Zadatak 6.6.7 Pokazati da ravni talasi (uporediti (2.9.6)),

$$\{\frac{e^{\imath\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mid -\infty\leq k_q\leq\infty,\ q=x,y,z\}, \tag{6.6.23}$$

čine drugu potpunu klasifikaciju stanja slobodne čestice.

Dakle, svojstveni problem od $\hat{T}$ može da se reši pomoću bilo kog od sledeća dva kompletna skupa kompatibilnih opservabli:

$$\hat{\mathbf{k}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar} \; (\hat{T} = \frac{\hbar^2 \hat{\mathbf{k}}^2}{2m}); \quad |\hat{\mathbf{k}}|, \; \hat{\mathbf{l}}^2, \; \hat{l}_z, \tag{6.6.24}$$

koji definišu ravne, odnosno sferne talase (kao zajednički svojstveni bazis).

Zadatak 6.6.8 Pretpostavimo da smo fiksirali $\mathbf{k}$ i da smo poklopili ort ose z sa ortom od $\mathbf{k}$. Pokazati da pri razvijanju[6.6.1] ravnog talasa $\langle \, \mathbf{r} \mid \mathbf{k} \rangle$ po sfernim talasima imamo samo sumu po l (bez integrala po k i sume po m).

Izloženo rešenje dinamičkog zakona slobodne čestice (videti § 3.2.3) je naročito korisno pri kvantno-mehaničkom opisivanju rasejanja čestice u polju koje ima tačkast izvor, tako da je naš koordinatni početak, koji je u definiciji $\hat{\mathbf{l}}$ implicitan, prirodno definisan.

6.6.6 Sferno-polarna koordinatna reprezentacija

Izomorfizmom možemo prevesti faktorizaciju $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi) = \mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\theta) \otimes \mathcal{L}^2(\varphi)$ na analognu faktorizaciju apstraktnog orbitnog prostora stanja čestice: $\mathcal{H}_o = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_\theta \otimes \mathcal{H}_\varphi$. Obe ove faktorizacije izražavaju na jeziku formalizma istu fizičku misao: postojanje radijalnog i dva uglovna stepena slobode čestice.

Može da se uvede potpuni skup kompatibilnih opservabli[6.6.2] $\hat{r}$, $\hat{\theta}$, $\hat{\varphi}$ u $\mathcal{H}_o$. Opservabla $\hat{r}$ deluje u $\mathcal{H}_r$, ima (uopšteni) svojstveni bazis $\{| \, r \,\rangle | 0 \leq r < \infty\}$ sa odgovarajućim čisto kontinualnim spektrom $\{r | 0 \leq r \leq \infty\}$ i kompletna je u $\mathcal{H}_r$. Opservabla $\hat{\theta}$ definiše se u $\mathcal{H}_\theta$, ima (uopšteni) svojstveni bazis $\{| \, \theta \,\rangle | 0 \leq \theta \leq \pi\}$ i čisto kontinualni spektar $\{\theta | 0 \leq \theta \leq \pi\}$ i kompletna je u $\mathcal{H}_\theta$. Opservabla $\hat{\varphi}$ se zadaje u $\mathcal{H}_\varphi$, ima (uopšteni) svojstveni bazis $\{| \, \varphi \,\rangle | 0 \leq \varphi < 2\pi\}$ i čisto kontinualni spektar $\{\varphi | 0 \leq \theta < 2\pi\}$ i kompletna je u $\mathcal{H}_\varphi$.

Takozvana *sferno-polarna koordinatna reprezentacija* je reprezentacija u zajedničkom svojstvenom bazisu od $\hat{r}$, $\hat{\theta}$, $\hat{\varphi}$: $\{| \, r \,\rangle \mid \theta \,\rangle \mid \varphi \,\rangle | \forall r, \theta, \varphi\}$. U ovoj reprezentaciji $\hat{r}$, $\hat{\theta}$, $\hat{\varphi}$ postaju multiplikativni operatori (tj. to je bazis u kom su oni dijagonalni), a sferni harmonici mogu da se pišu u vidu $Y_l^m(\theta,\varphi) = \langle \, \theta, \varphi \mid lm \rangle$, $\forall l, m$.

Uopšteni vektori $\{| \, \theta, \varphi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} | \, \theta \rangle \mid \varphi \rangle | \forall \theta, \varphi\}$ čine najosnovniji bazis u uglovnom faktor prostoru $\mathcal{H}_\Omega \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_\theta \otimes \mathcal{H}_\varphi$, a standardni bazis za $\hat{l}_\Omega$ predstavlja drugu, veoma važnu, alternativu bazisa u tom prostoru.

6.6.7 Ireducibilni invarijantni potprostori

Što se tiče geometrije koja odgovara dijagramu "ormar sa fiokama" u $\mathcal{L}^2(\Omega)$ (podsetiti se Crteža C 6.2), $\mathcal{V}_k$ je sad $\mathcal{V}_l$, a dimenzija mu je $(2l+1)d_l = 2l+1$, tj. $d_l = 1$, jer $\hat{\mathbf{l}}^2_\Omega$ i $[\hat{l}_z]_\Omega$ čine potpun skup

[6.6.1] Razvijanje ravnih talasa po sfernim videti na primer u: A. Messiah, *Quantum Mechanics*, **1**, str. 358-359 (North-Holland, Amsterdam, Amsterdam, 1961).

[6.6.2] Mi smo uveli implicitno uveli faktorizaciju $\mathcal{H}_o = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_\theta \otimes \mathcal{H}_\varphi$. Sistematski potupak bi se sastojao u zamenjivanju osnovnog skupa opservabli $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$ novim osnovnim skupom $\hat{r}$, $\hat{B}_r$; $\hat{\theta}$, $\hat{B}_\theta$; $\hat{\varphi}$, $\hat{B}_\varphi$ u $\mathcal{H}_o$, u kom bi operatori bili funkcije $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$; svaki operator iz jednog para komutirao bi sa svakim operatorom iz bilo kog od druga dva para; $\hat{r}$, $\hat{B}_r$ bi, sa svoje strane, kao osnovni skup, definisao $\mathcal{H}_r$ itd.

kompatibilnih opservabli. Drugim rečima, $2l+1$ sfernih harmonika $\{Y_l^m | m = -l, -l+1, ..., l\}$ obrazuju ireducibilni invarijantni potprostor $\mathcal{V}_l$ $(= \mathcal{V}_{l,\lambda=1})$ za vektorski operator $\hat{\mathbf{l}}$ u $\mathcal{L}^2(\Omega)$ i to za $l = 0, 1, ...$

U opštoj teoriji imali smo otvoren fazni faktor za $| \, k, m = k, \lambda \, \rangle$, $\forall \lambda$ (za ostale m vektori su jednoznačno sledili), a (6.6.14) je ekvivalentno tom izboru faznog faktora. Problem iznalaženja standardnog bazisa za $\hat{\mathbf{l}}$ rešili smo u uglovnom faktor prostoru $\mathcal{L}^2(\Omega)$. Tu smo dobili i pomenute ireducibilne invarijantne potprostore $\mathcal{V}_l$. Sada ćemo preći na celi jednočestični orbitni prostor $\mathcal{L}^2(r, \theta, \varphi)$.

Pošto smo imali $\mathcal{L}^2(\Omega) = \oplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{V}_l$ (uporediti (6.3.1) u opštoj teoriji) i $\mathcal{L}^2(r, \theta, \varphi) = \mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\Omega)$ usled distributivnosti (ortogonalnog zbira potprostora u odnosu na direktni proizvod) sledi:

$$\mathcal{L}^2(r, \theta, \varphi) = \oplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{V}_l. \tag{6.6.25}$$

Potprostori $\mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{V}_l$ $(l = 0, 1...)$ su višestruki invarijantni ireducibilni potprostori u $\mathcal{L}^2(r, \theta, \varphi)$, realizacije potprostora $\mathcal{V}_k$ iz (6.3.1). Dimenzija ovih potprostora iznosi $(2l+1)d_l = (2l+1)\aleph_0 = \aleph_0$ ($\aleph_0$ — potencija prebrojivo beskonačnog skupa je dimenzija od $\mathcal{L}^2(r)$).

6.7 Rotacije u orbitnom prostoru stanja čestice

U ovom odeljku ćemo proučiti operatore rotacije u orbitnom prostoru stanja jedne čestice sa nešto više detalja i u konkretnijoj formi nego što smo to učinili u slučaju opštih rotacija (§ 6.4). Odgovorićemo na sledeća pitanja: Kakav je odnos rotacija prema osnovnom skupu opservabli $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ u $\mathcal{H}_o$? Kako deluju rotacije u koordinatnoj i impulsnoj reprezentaciji? Kako se sferni harmonici menjaju pod delovanjem rotacija?

6.7.1 Operatori rotacije u koordinatnoj reprezentaciji

U apstraktnom prostoru stanja jedne čestice $\mathcal{H}_o$ operatori rotacije glase: $\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{l}}}$ (uporediti (5.2.10) kao i Stav S 6.4.1).

Pošto je u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$: $\hat{\mathbf{l}} = -\imath\hbar\mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}$ operator proizvoljne rotacije u koordinatnoj reprezentaciji ima vid

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\phi\mathbf{u}\cdot(\mathbf{r}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}})}, \quad \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}. \tag{6.7.1}$$

Prvo ćemo proučiti delovanje operatora rotacije (6.7.1) na talasne funkcije $\psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbf{r})$.

Teorem 6.7.1 *Operatori rotacije deluju u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ na sledeći način:*

$$\boxed{\hat{U}(\phi\mathbf{u})\psi(\mathbf{r}) = \psi(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}), \quad \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}}, \tag{6.7.2}$$

gde se pod $R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}$ podrazumeva proizvod matrice i brojne kolone.

Dokaz: Ići ćemo od DS-e u (6.7.2) ka LS-i. Neka je ort $\mathbf{u}$ fiksiran. Posmatrajmo DS-u kao složenu funkciju $\psi(\boldsymbol{\xi})$, $\boldsymbol{\xi}(\phi, \mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}$. Definišući $\boldsymbol{\xi}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\xi}(\phi = 0, \mathbf{r}) = \mathbf{r}$, razvijmo $\psi(\boldsymbol{\xi})$ u Taylor-ov red po $\boldsymbol{\xi}$ oko $\boldsymbol{\xi}_0 = \mathbf{r}$ (pretpostavljajući da je $\psi(\boldsymbol{\xi})$ analitička funkcija). U Dodatku § 6.7.7 biće pokazano da se ovaj Taylor-ov red može napisati u vidu

$$\psi(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}) = e^{\Delta\boldsymbol{\xi}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}}\psi(\mathbf{r}). \tag{6.7.3}$$

S druge strane, da bismo izračunali $\Delta\boldsymbol{\xi}$, razvijamo $\boldsymbol{\xi}(\phi,\mathbf{r})$ u Taylor-ov red po ϕ oko $\phi=0$ (za fiksirano $\mathbf{r}$) i to do prvog reda. U stvari,

$$\Delta\boldsymbol{\xi} = \left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}}{\mathrm{d}\phi}\right)_{\phi=0}\phi. \tag{6.7.4}$$

U Dodatku § 6.7.8 videćemo da se može pisati

$$\left(\frac{\mathrm{d}R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}}{\mathrm{d}\phi}\right)_{\phi=0} = -\mathbf{u}\times\mathbf{r}. \tag{6.7.5}$$

Kada na osnovu $\boldsymbol{\xi} \stackrel{\mathrm{def}}{=} R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}$, (6.7.5) zamenimo u (6.7.4), (6.7.4) onda zamenimo u (6.7.3) i ispermutujemo faktore mešovitog proizvoda ciklično, onda dolazimo do rezultata

$$\psi(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}) = e^{-\phi\mathbf{u}\cdot(\hat{\mathbf{r}}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}})}\psi(\mathbf{r}). \tag{6.7.6}$$

Upoređujući (6.7.6) i (6.7.1) vidimo da smo dokazali[6.7.1] TeoremT 6.7.1. *Q. E. D.*

6.7.2 Delovanje na $\hat{\mathbf{r}}$

Sad ćemo izvući neke zaključke koji neposredno slede iz Teorema T 6.7.1.

Korolar 6.7.1 *Operatori rotacije u $\mathcal{H}_o$ deluju na zajedničke svojstvene vektore $\mid \mathbf{r}\,\rangle$ od $\hat{\mathbf{r}}$ na sledeći način:*

$$\boxed{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) \mid \mathbf{r}\,\rangle = \mid R(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}\,\rangle, \quad \forall\mathbf{r},\ \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}}. \tag{6.7.7}$$

Dokaz: Ako je $\mathbf{r}_0$ fiksirani, a $\mathbf{r}$ tekući radijus vektor, onda je $\langle\, \mathbf{r}_0 \mid \mathbf{r}\rangle = \delta(\mathbf{r}_0-\mathbf{r})$ kontinualna brojna kolona koja reprezentuje $\mid \mathbf{r}_0\,\rangle$ u koordinatnoj reprezentaciji. Preskripcija (6.7.2) daje $\hat{U}(\phi\mathbf{u})\delta(\mathbf{r}_0-\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}_0-R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}) = \delta(R(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}_0-\mathbf{r})$. Iz ovoga zaključujemo da važi (6.7.7) (kad $\mathbf{r}_0$ zamenimo sa $\mathbf{r}$). *Q. E. D.*

Zadatak 6.7.1 Dokazati da $\delta(\mathbf{r}_0-R^{-1}\mathbf{r}) = \delta(R\mathbf{r}_0-\mathbf{r})$.

Korolar 6.7.2 *Operatori rotacije u $\mathcal{H}_o$ imaju sledeće dejstvo na vektorski operator radijus vektora:*

$$\boxed{\hat{U}(\phi\mathbf{u})\hat{\mathbf{r}}\hat{U}^{-1}(\phi\mathbf{u}) = R^{-1}(\phi\mathbf{u})\hat{\mathbf{r}}, \quad \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}}. \tag{6.7.8}$$

Treba imati u vidu da je $\hat{\mathbf{r}}$ u (6.7.8) u stvari kolona od tri operatora $\hat{x},\hat{y},\hat{z}$, jer samo tako je množenje sleva matricom $R^{-1}(\phi\mathbf{u})$ definisano.

Zadatak 6.7.2 Dokazati (6.7.8).

6.7.3 Delovanje na $\hat{\mathbf{p}}$

Korolar 6.7.3 *Delovanje operatora rotacije $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ u $\mathcal{H}_o$ na zajedničke svojstvene vektore $\mid \mathbf{p}\,\rangle$ vektorske opservable $\hat{\mathbf{p}}$ je sledeće:*

$$\boxed{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) \mid \mathbf{p}\,\rangle = \mid R(\phi\mathbf{u})\mathbf{p}\,\rangle \ \forall\mathbf{p},\forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}}. \tag{6.7.9}$$

[6.7.1] U stvari dokaz važi neposredno samo za analitičke funkcije iz $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$. Međutim, takve funkcije čine linearnu mnogostrukost koja je gusta u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$, a $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$, pošto je unitaran operator, on je i neprekidan, te se (6.7.2) može proširiti i na limese, tj. na sve vektore u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$.

Dokaz: Vektor $|\,\mathbf{p}\,\rangle$ se u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ reprezentuje sa $\langle\,\mathbf{r}\mid\mathbf{p}\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$ (uporediti (2.9.6)), a rotacija daje $\hat{U}(\phi\mathbf{u})(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r})} = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}(R(\phi\mathbf{u})\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}} = \langle\,\mathbf{r}\mid R(\phi\mathbf{u})\mathbf{p}\rangle$. *Q. E. D.*

Korolar 6.7.4 *Delovanje operatora rotacije na vektorski operator impulsa u $\mathcal{H}_o$ sastoji se u sledećem:*

$$\boxed{\hat{U}(\phi\mathbf{u})\hat{\mathbf{p}}\hat{U}^{-1}(\phi\mathbf{u}) = R^{-1}(\phi\mathbf{u})\hat{\mathbf{p}}, \quad \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}}. \tag{6.7.10}$$

Zadatak 6.7.3 Dokazati (6.7.10).

Čitalac će lako uočiti da (6.7.7) i (6.7.9) pokazuju da $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ indukuje u $\mathcal{P}(\mathcal{H}_o)$ delovanje upravo kakvo očekujemo s obzirom na konkretnu prirodu korespondencije stanje $\leftrightarrow$ ansambl iz Postulata o stanjima (videti § 2.4.6 i kraj od § 5.2.1). Ovde se opet radi o izomorfizmu ι_7 sa Crteža C 5.2.

Dakle, ispostavilo se da za celu Galilejevu grupu stvarno važi "komutativnost" donje polovine Crteža C 5.2: $\alpha_8 \circ \iota_6 \circ \alpha_5 = \alpha_7$. Pošto ι_7 bazira u stvari na prva tri Postulata, a alternativni put $\alpha_8 \circ \iota_6 \circ \alpha_5$ na Postulatu o kvantizaciji, ovo slaganje pokazuje uzajamnu usklađenost postulata.

6.7.4 Operatori rotacije u impulsnoj reprezentaciji

Sad možemo lako dobiti delovanje rotacija u impulsnoj reprezentaciji.

Teorem 6.7.2 *Operatori rotacije $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ koji deluju na funkcije $\psi(\mathbf{p})$ u impulsnoj reprezentaciji imaju sledeći vid:*

$$\boxed{\hat{U}(\phi\mathbf{u})\psi(\mathbf{p}) = \psi(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{p}), \quad \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}}. \tag{6.7.11}$$

Dokaz: $\hat{U}(\phi\mathbf{u})\psi(\mathbf{p}) = \langle\mathbf{p}\mid\hat{U}(\phi\mathbf{u})\mid\psi\,\rangle = (\langle\mathbf{p}\mid\hat{U}(\phi\mathbf{u}))\mid\psi\,\rangle$. Pošto je bra u zagradi dualni vektor od keta $\hat{U}(\phi\mathbf{u})^\dagger\mid\mathbf{p}\,\rangle = \hat{U}(\phi\mathbf{u})^{-1}\mid\mathbf{p}\,\rangle = \mid R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{p}\,\rangle$ (prema (6.7.9)), na kraju dolazimo do $\hat{U}(\phi\mathbf{u})\psi(\mathbf{p}) = \psi(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{p})$. *Q. E. D.*

6.7.5 Rotacije u uglovnom prostoru

Postavlja se pitanje kako se rotacije odnose prema faktorizaciji

$$\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi) = \mathcal{L}^2(r)\otimes\mathcal{L}^2(\theta)\otimes\mathcal{L}^2(\varphi). \tag{6.7.12}$$

Teorem 6.7.3 *Operatori rotacije u $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi)$ deluju netrivijalno samo u uglovnom faktor prostoru $\mathcal{L}^2(\Omega)$:*

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = \hat{I}_r\otimes\hat{U}_\Omega(\phi\mathbf{u}), \quad \hat{U}_\Omega(\phi\mathbf{u}) \overset{\text{def}}{=} e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{l}}_\Omega}, \tag{6.7.13a,b}$$

a $[\hat{l}_q]_\Omega$ ($q = x,y,z$) dati su sa (6.5.13).

Dokaz: Pošto je $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ u $\mathcal{L}^2(\Omega)$ dat preko reda $\sum_{n=0}^\infty \frac{(-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{l}})^n}{n!}$, a $\hat{\mathbf{l}} = \hat{I}_r\otimes\hat{\mathbf{l}}_\Omega$, imamo $\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = \hat{I}_r\otimes\sum_{n=0}^\infty \frac{(-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{l}}_\Omega)^n}{n!} = \hat{I}_r\otimes\hat{U}_\Omega(\phi\mathbf{u})$. *Q. E. D.*

6.7.6 Delovanje na sferne harmonike

Kao što smo videli u odeljku § 6.6, sferni harmonici čine standardan bazis za $\hat{\mathbf{l}}_\Omega$. Prema tome iz opšte formule (6.4.5) (uporediti i K 6.4.2) odmah sledi:

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u})Y_l^m(\theta,\varphi) = \sum_{m'=-l}^{l} U_{m'm}^{(l)}(\phi\mathbf{u})Y_l^{m'}(\theta,\varphi). \tag{6.7.14}$$

Nameće se pitanje ima li LS konkretniji vid na jeziku funkcionalne zavisnosti od θ i φ.

Odgovor ćemo prvo dati za važan specijalan slučaj.

Ako se ograničimo na podgrupu vrtnji oko (fiksirane) z-ose, onda se kao generator rotacija pojavljuje jedino $\hat{l}_z$. To znači da i sve dotične vrtnje deluju netrivijalno samo u $\mathcal{L}^2(\varphi)$. Bazis $\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\imath m\varphi}|m=0,\pm1\pm2,...\}$ u tom faktor prostoru (uporediti kraj paragrafa § 6.5.8) je svojstveni bazis ne samo za $[\hat{l}_z]_\varphi$, nego i za svaki operator vrtnje oko z-ose $\hat{U}_\varphi(\varphi\mathbf{z}_0) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\varphi[\hat{l}_z]_\varphi}$:

$$\hat{U}_\varphi(\varphi\mathbf{z}_0)\frac{1}{2\pi}e^{\imath m\varphi} = e^{-\imath m\varphi}\frac{1}{2\pi}e^{\imath m\varphi}, \tag{6.7.15}$$

što važi za $-\pi < \varphi \leq \pi$ i za svako m.

Dakle, operatori vrtnji oko z-ose imaju vid

$$\hat{U}(\varphi\mathbf{z}_0) = \hat{I}_r \otimes \hat{I}_\theta \otimes \hat{U}_\varphi(\varphi\mathbf{z}_0), \tag{6.7.16}$$

a na sferne harmonike deluju preko formule

$$\hat{U}_\Omega(\varphi\mathbf{z}_0)Y_l^m(\theta,\varphi) = e^{-\imath m\varphi}Y_l^m(\theta,\varphi), \quad -\pi < \varphi \leq \pi, \quad \forall m \tag{6.7.17}$$

(uporediti (6.6.7)).

Vratimo se opštem slučaju, gde je ort rotacije $\mathbf{u}$ proizvoljan. Do sada smo sferne polarne uglove θ,φ tekućeg radijus vektora r pisali skraćeno sa Ω. Sada ćemo ih zameniti ortom $\mathbf{v}$ koji Ω definiše na jediničnoj sferi. Očigledno je skup svih ortova biunivoko povezan sa skupom svih (različitih) parova sfernih polarnih uglova, simbolom:

$$\{\mathbf{v}\} \leftrightarrow \{(\theta,\varphi) \stackrel{\text{def}}{=} \Omega\}. \tag{6.7.18}$$

Lema 6.7.1 *Pišući sferne harmonike kao $Y_l^m(\mathbf{v})$ (u smislu (6.7.18)), oni se na sledeći način menjaju pod rotacijama:*

$$\boxed{\hat{U}_\Omega(\phi\mathbf{u})Y_l^m(\mathbf{v}) = Y_l^m(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{v}) = \sum_{m'=-l}^{l} U_{m'm}^{(l)}(\phi\mathbf{u})Y_l^{m'}(\theta,\varphi)}. \tag{6.7.19}$$

Dokaz: Iz (6.7.2) za svako $f(r) \in \mathcal{L}^2(r)$ sledi: $\hat{U}(\phi\mathbf{u})f(r)Y_l^m(\mathbf{v}) = f(r)Y_l^m(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{v})$, a (6.7.13$a$) daje LS = $f(r)\hat{U}_\Omega(\phi\mathbf{u})Y_l^m(\mathbf{v})$. Izjednačavanje desnih strana dovodi do

$$f(r) \otimes [\hat{U}_\Omega(\phi\mathbf{u})Y_l^m(\mathbf{v}) - Y_l^m(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{v})] = 0. \tag{6.7.20}$$

Pošto jedan od faktora mora biti nula kada je direktni proizvod nula, imamo (6.7.19). *Q. E. D.*

Zadatak 6.7.4 Pokazati da se u slučaju vrtnje oko z-ose (6.7.19) svodi na (6.7.17).

6.7.7 * Dodatak — Dokaz formule (6.7.3)

Pođimo od analitičke kompleksne funkcije vektorskog argumenta $\psi(\boldsymbol{\xi})$ i razvijmo je u Taylor-ov red oko tačke $\boldsymbol{\xi}=\mathbf{r}$ (tj. $\xi_q = q,\ q=x,y,z$):

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) = \psi(\mathbf{r}) + \sum_{q=x,y,z}(\xi_q - q)[\frac{\partial\psi(\boldsymbol{\xi})}{\partial\xi_q}]_{\boldsymbol{\xi}=\mathbf{r}} + \frac{1}{2}\sum_{q,q'=x,y,z}(\xi_q-q)(\xi_{q'}-q')[\frac{\partial^2\psi(\boldsymbol{\xi})}{\partial\xi_q\,\partial\xi_{q'}}]_{\boldsymbol{\xi}=\mathbf{r}} + \ldots$$

Kompaktnije napisano

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[\sum_{q=x,y,z}\Delta\xi_q\frac{\partial}{\partial\xi_q}]^n_{\boldsymbol{\xi}=\mathbf{r}}\psi(\boldsymbol{\xi}),\quad \Delta\boldsymbol{\xi}\stackrel{\text{def}}{=}\boldsymbol{\xi}-\mathbf{r}\Longleftrightarrow\Delta\xi_q\stackrel{\text{def}}{=}\xi_q - q,\quad q=x,y,z. \quad (6.7.21a,b)$$

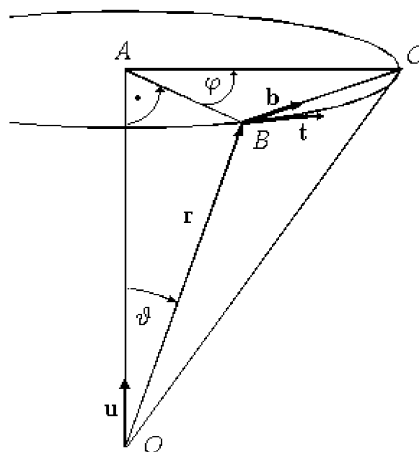
U (6.7.21a) imamo u indeksu $\boldsymbol{\xi}=\mathbf{r}$ i to se odnosi samo na n-ti izvod, a ne i na $\Delta\xi_q$.

Stavljanje $\boldsymbol{\xi}=\mathbf{r}$ nakon n-tog diferenciranja se formalno svodi na smenu promenljive. Očigledno je svejedno da li ćemo uzeti n-ti izvod po ξ_x, ξ_y i ξ_z, pa zatim staviti $\boldsymbol{\xi}=\mathbf{r}$ ili ćemo odmah staviti $\boldsymbol{\xi}=\mathbf{r}$, pa onda uzeti n-ti izvod po x, y i z. Stoga, (6.7.21a) prelazi u

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[\sum_{q=x,y,z}\Delta\xi_q\frac{\partial}{\partial q}]^n_{\boldsymbol{\xi}=\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}). \quad (6.7.22)$$

Jednakost (6.7.22) se može prepisati operatorskom eksponencijalnom funkcijom:

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) = e^{\Delta\boldsymbol{\xi}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}}\psi(\mathbf{r}). \quad (6.7.23)$$



Slika 6.5: **Uz dokaz (6.7.5).**

6.7.8 * Dodatak — dokaz formule (6.7.5)

Sa Crteža C 6.5 odmah se vidi da je u prvom redu veličine $\|R(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}-\mathbf{r}\|\approx\phi r\sin\theta$, što daje ($\mathbf{b}$ je ort tetive $\overrightarrow{BC}$, a $\mathbf{t}$ ort tangente u B):

$$[\frac{\mathrm{d}R(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}}{\mathrm{d}\phi}]_{\phi=0} = \lim_{\phi\to 0}\frac{\phi\sin\theta\mathbf{b}}{\phi} = r\sin\theta\mathbf{t} = r\sin\theta\frac{\mathbf{u}\times\mathbf{r}}{\|\mathbf{u}\times\mathbf{r}\|}.$$

Pošto je $\|\mathbf{u}\times\mathbf{r}\| = r\sin\theta$,

$$[\frac{\partial R(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}}{\partial\phi}]_{\phi=0} = \mathbf{u}\times\mathbf{r}. \quad (6.7.24)$$

Usled $R^{-1}(\phi\mathbf{u}) = R(\phi(-\mathbf{u}))$, (6.7.24) daje (6.7.5).

Zadatak 6.7.5 Pokazati da je razlika dužine luka BC i dužine tetive BC jednaka nuli u prvom redu po malom uglu ϕ (videti Crtež C 6.5).

6.8 Zeeman-ov efekat

Ako se mere energetski nivoi atoma koji se nalazi u spoljašnjem magnetnom polju, nastaje povećanje broja nivoa u odnosu na slučaj bez spoljašneg polja. Ova pojava je u prisnoj vezi sa operatorom projekcije uglovnog momenta na pravac magnetnog polja i sa njegovim kvantnim brojem. U ovom odeljku proučićemo jedan uprošćen model pomenute pojave.

6.8.1 Pojam i klasični osnovi Zeeman-ovog efekta

Projekcija orbitnog uglovnog momenta $\hat{l}_z$ igra specifičnu ulogu u objašnjenju jedne kvantne pojave koja se naziva *Zeeman-ov efekat*. Radi se o promeni energetskih nivoa (tj. vrednosti energija) vezane čestice sa električnim nabojem (ili sistema ovakvih čestica) u konstantnom (u toku vremena) i homogenom (u prostoru) *magnetnom polju*. Nastaje tzv. *cepanje degenerisanog energetskog nivoa* sistema (engleski: *splitting*) u nekoliko novih nivoa.

Da bismo objasnili Zeeman-ov efekat, moramo i ovoga puta poći od temelja koji leže u klasičnoj fizici i to u klasičnoj teoriji elektromagnetnih (od sada EM) pojava.

Stav 6.8.1 *Klasična Hamilton-ova funkcija sistema od Z čestica sa masama m_i i električnim nabojima q_i, $i = 1, ..., Z$, u EM polju $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, $\Phi(\mathbf{r}, t)$ glasi:*

$$H = \sum_{i=1}^{Z} \frac{1}{2m_i}(\mathbf{p}_i - \frac{q_i}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t))^2 - \sim_{i=1}^{Z} q_i \Phi(\mathbf{r}_i, t). \tag{6.8.1}$$

Treba zapaziti da (6.8.1) opisuje neinteragujući sistem čestica u EM polju.

6.8.2 Kvantni hamiltonijan

Elektromagnetni fenomeni se u kvantnoj mehanici opisuju semiklasično (ili semikvantno) tako da se klasična Hamilton-ova funkcija (6.8.1) kvantuje prelazeći na operatore u radijus-vektorskoj reprezentaciji, tj. u prostoru stanja $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_Z)$. Pri tome $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, $\Phi(\mathbf{r}, t)$ postaju multiplikativni operatori (vektorski odnosno skalarni), tj. funkcije od $\mathbf{r}$.

U potpuno kvantovanom tretmanu, koji se primenjuje u tzv. kvantnoj elektrodinamici, prvo se kvantuje EM polje drastičnijim postupkom nego što je upravo opisani prelazak na operatore i tako se dobijaju fotoni (kvanti EM polja). Onda se proučava interakcija naelektrisanih materijalnih čestica sa fotonima.

Kao što smo rekli, u kvantnoj mehanici se hamiltonijan sistema od Z čestica sa naelektrisanjem dobija prepisujući (6.8.1) na jeziku operatora:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{Z} \frac{1}{2m_i}(\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{q_i}{c}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_i, t))^2 - \sum_{i=1}^{Z} q_i \hat{\Phi}(\mathbf{r}_i, t). \tag{6.8.2}$$

Kao što je rečeno u paragrafu § 6.8.1, Zeeman-ov efekat se pojavljuje kad se sistem nalazi u spoljašnjem konstantnom i homogenom magnetnom polju, tj. kada je $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}$

(gde smo sa **E** i **B** obeležili električno, odnosno magnetno polje). Na jeziku vektorskog potencijala to možemo prepisati u vidu:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=\frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r},\quad \Phi(\mathbf{r},t)=0. \qquad (6.8.3a,b)$$

Zadatak 6.8.1 Dokazati ovaj iskaz i pokazati da (6.8.3) zadovoljava Coulomb-ovo kalibrisanje. Treba se podsetiti formula

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t)=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t}-\text{grad }\Phi(\mathbf{r},t),\quad \mathbf{B}(\mathbf{r},t)=\text{rot}\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \qquad (6.8.4a,b)$$

kao i Coulomb-ovog kalibrisanja

$$\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=0. \qquad (6.8.5)$$

Pre nego što zamenimo (6.8.3) u (6.8.2), uočimo da važi

$$(\hat{\mathbf{p}}_i-\frac{q_i}{c}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_i,t))^2=\hat{\mathbf{p}}_i^2-\frac{q_i}{c}(\hat{\mathbf{p}}_i\cdot\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_i,t)+\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_i,t)\cdot\hat{\mathbf{p}}_i)+\frac{q_i^2}{c^2}\hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}_i,t). \qquad (6.8.6)$$

Zamenom (6.8.3*a*) u (6.8.6) lako sledi

$$(\hat{\mathbf{p}}_i-\frac{q_i}{c}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_i,t))^2=\hat{\mathbf{p}}_i^2-\frac{q_i}{c}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{l}}_i+\frac{q_i^2}{4c^2}B^2r_{i\perp}^2, \qquad (6.8.7)$$

gde je $\hat{\mathbf{l}}_i\overset{\text{def}}{=}\hat{\mathbf{r}}_i\times\hat{\mathbf{p}}_i$ orbitni uglovni moment i-te čestice, $r_\perp$ je projekcija od $\mathbf{r}$ na ravan koja je normalna na $\mathbf{B}$, a B je moduo od $\mathbf{B}$.

Supstitucija jednakosti (6.8.7) u (6.8.2) i to u primeni na *elektronski omotač* atoma daje:

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{Z}\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e}+\frac{|e|}{2m_ec}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{L}}+\frac{e^2B^2}{8m_ec^2}\sum_{j=1}^{Z}r_{j\perp}^2, \qquad (6.8.8)$$

gde je $\hat{\mathbf{L}}\overset{\text{def}}{=}\sum_{i=1}^{Z}\hat{\mathbf{l}}_i$ vektorski operator ukupnog orbitnog uglovnog momenta omotača, m_e masa, a $q=-|e|$ (negativni) električni naboj elektrona.

U hamiltonijan (6.8.8) uključili smo pored kinetičke energije samo spoljašnje magnetno polje koje izaziva Zeeman-ov efekat. Pošto se radi o omotaču električno neutralnog atoma rednog broja Z (u periodnom sistemu), a to je naš realni fizički sistem u kome posmatramo Zeeman-ov efekat, onda još moramo uključiti i spoljašnje Coulomb-ovo polje od jezgra, kao i Coulomb-ovu interakciju među elektronima. Tako se iz (6.8.8) najzad dobija

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{Z}(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e}-\frac{Ze^2}{r_i})+\sum_{i<j}^{Z}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|}+\frac{|e|}{2m_ec}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{L}}+\frac{e^2B^2}{8m_ec^2}\sum_{j=1}^{Z}r_{j\perp}^2. \qquad (6.8.9)$$

U ostatku ovog odeljka primenićemo (6.8.9) na slučaj jednog elektrona. Imamo u vidu *jedan valentni elektron*, tj. elektron van popunjenih ljuski (u atomu alkalnog metala). Pomenute zatvorene ljuske (od $Z-1$ elektrona) praktično ne interaguju sa magnetnim poljem u Zeeman-ovom efektu, nego je gotovo sva interakcija ograničena na valentni elektron.

Radi jednostavnosti izostavićemo tzv. *screening*[6.8.1] efekat zatvorenih ljuski, koji se sastoji u znatnom slabljenju privlačnog dejstva jezgra (zbog zaklanjanja popunjenih ljuski ili, ekvivalentno, zbog odbojnog delovanja elektrona u tim ljuskama).

[6.8.1] Engleski zastiranje, zaklanjanje; čitati: skrining.

Tako dolazimo do jednočestičnog hamiltonijana za valentni elektron:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} + \mu_B \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{l}} + \frac{e^2 B^2}{8m_e c^2} r_\perp^2, \tag{6.8.10}$$

gde smo sa $\mu_B \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|e|}{2m_e c}$ označili tzv. *Bohr-ov magneton*[6.8.2], koji služi kao prirodna jedinica za orbitni magnetni dipolni moment $\hat{\boldsymbol{\mu}}_l \stackrel{\text{def}}{=} -\mu_B \hat{\mathbf{l}}$.

6.8.3 Ocenjivanje relativne važnosti članova u hamiltonijanu

Da bismo grubo ocenili odnos veličina četvrtog i trećeg člana u hamiltonijanu (6.8.10), pretpostavićemo da je stanje elektrona $|\,\psi\rangle$ takvo da za očekivane vrednosti u tom stanju važi (usmerivši z-osu duž vektora $\mathbf{B}$):

$$\langle\, \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{l}}\, \rangle = B \langle\, \hat{l}_z\, \rangle \approx B\hbar, \quad \langle\, r_\perp^2\, \rangle \approx a_0^2, \tag{6.8.11a,b}$$

gde je a_0 tzv. Bohr-ov radijus (tj. poluprečnik vodonikovog atoma), a $\approx$ znači "reda veličine". Na ovaj način se dobija[6.8.3] da je odnos "veličine" četvrtog i trećeg člana u (6.8.10) reda veličine $B/(10^{10}\text{gaussa})$.

Pošto se u laboratorijskim uslovima ne postižu magnetna polja jačine preko 10^4gaussa, četvrti član je šest redova ispod trećeg i stoga je zanemarljiv pored njega[6.8.4]. U nekim vanlaboratorijskim uslovima stvari stoje drugačije. Na primer, veruje se da na površini tzv. neutronskih zvezda postoje magnetna polja čija jačina dostiže 10^{12} gaussa. Tu se struktura atoma bitno razlikuje od strukture na koju nailazimo pod zemaljskim uslovima.

Da bismo bili načisto sa važnošću trećeg člana u (6.8.10), navešćemo i ocenu odnosa njegove "veličine" i "veličine" Coulomb-ovog (tj. drugog) člana. Ispostavlja se (videti fusnotu 6.8.3) da je ovaj odnos sličnog reda veličine: $B/(10^9\text{gaussa})$. Znači i treći član, čiji uticaj na energetske nivoe elektrona je upravo predmet našeg proučavanja, je zanemarljivo mali u odnosu na Coulomb-ovu energiju vezivanja elektrona za jezgro[6.8.5]. Mi ćemo zanemariti četvrti član, a treći ne, nego ćemo ga uzimati u obzir kao malu perturbaciju. Efekti do kojih treći član dovodi mogu se posmatrati u laboratoriji.

6.8.4 Neperturbisani hamiltonijan

Kao što smo rekli, hamiltonijan (6.8.10) prepisujemo u vidu perturbisanog hamiltonijana (uporediti § 3.4.1 u vezi sa terminima iz teorije perturbacije) i tako dolazimo do sledećeg svojstvenog problema hamiltonijana:

$$\boxed{(\hat{H}_0 + \mu_B B \hat{l}_z)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})}, \tag{6.8.12a}$$

[6.8.2] Neki autori definišu $\mu_B \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{|e|}{2m_e c}$, onda odgovarajući član u (6.8.10) glasi $-\mu_B \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{l}}$. Za hadrone (tj. protone, neutrone i druge teške elementarne čestice) kao jedinica za magnetni dipolni moment služi tzv. nuklearni magneton $\frac{|e|}{2m_p c}$, gde je $e = |e|$ naboj, a m_p masa protona.

[6.8.3] Detaljnije videti u: S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, John Wiley and Sons, Inc., New York, 212, 1974.

[6.8.4] Kao što je poznato iz atomske fizike, ovaj mali četvrti član u (6.8.10) je u vezi sa tzv. dijamagnetizmom.

[6.8.5] Pošto smo izostavili *screening* efekat zatvorenih ljuski, mi u stvari u svojoj proceni znatno natcenjujemo veličinu energije vezivanja elektrona za Coulomb-ovo polje od jezgra.

gde je

$$\boxed{\hat{H}_0 \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}} \tag{6.8.12b}$$

neperturbisani hamiltonijan. Sabirak $\mu_B B\hat{l}_z$ je perturbacija.

U paragrafu § 6.6.5 uverili smo se da je operator kinetičke energije $\hat{T} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2$ kompatibilan sa $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$. Pošto Coulomb-ov potencijal $-\frac{Ze^2}{r}$ deluje netrivijalno samo u radijalnom faktor prostoru $\mathcal{L}^2(r)$, a $\hat{\mathbf{l}}$ samo u $\mathcal{L}^2(\Omega)$, to imamo $[\ \hat{H}_0, \hat{\mathbf{l}}^2\ ] = [\ \hat{H}_0, \hat{l}_z\ ] = 0$. Stoga i za problem vodoniku-sličnog atoma — kao što ćemo svojstveni problem od $\hat{H}_0$ datog sa (6.8.12b) zvati u odeljku § 9.1 — možemo potpunu klasifikaciju stanja u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ dobiti putem direktnog proizvoda sfernih harmonika iz $\mathcal{L}^2(\Omega)$ sa rešenjina radijalne jednačine (drugi korak u separaciji varijabli).

Sada ćemo samo anticipirati rezultate (za detaljniji tretman videti § 9.1). Energetski nivoi od $\hat{H}_0$, označavaćemo ih sada sa E^0_{nl}, zavise[6.8.6] pored l i od jednog drugog kvantnog broja n (tzv. glavni kvantni broj).

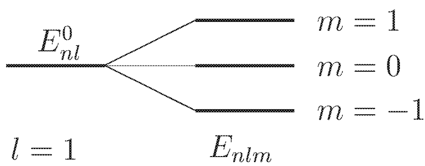
Odgovarajuće (s tačnošću do faznog faktora) jednoznačno određene svojstvene vektore pisaćemo u vidu $R_{nl}(r)Y^m_l(\theta,\varphi)$. Ovi svojstveni vektori čine standardan bazis za $\hat{\mathbf{l}}$.

6.8.5 Perturbacija i cepanje nivoa

Kao što smo videli, pomenuti vektori $R_{nl}(r)Y^m_l(\theta,\varphi) \in \mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ su svojstveni vektori za $\hat{l}_z$, te stoga i za perturbaciju u (6.8.12a). Iz ovoga odmah sledi da energetski nivoi perturbisanog hamiltonijana (6.8.12a) glase:

$$\boxed{E_{nlm} = E^0_{nl} + m\hbar\mu_B B, \quad m = -l, ..., l}. \tag{6.8.13}$$

Cepanje neperturbisanog nivoa E^0_{nl}, (tj. nivoa sa $B = 0$) na $2l+1$ ekvidistantnih nivoa — što je u stvari Zeeman-ov efekat — ilustrovano je na Crtežu C 6.6 za $l = 1$ (tzv. p nivo).



Slika 6.6: **Cepanje nivoa.**

Treba uočiti da je nivo sa negativnom vrednošću magnetnog kvantnog broja m niži od neperturbisanog, tj. da je energija vezivanja elektrona u magnetnom polju Zeeman-ovog efekta (a "vezivanje" po definiciji znači negativan energetski član, tj. sniženje nivoa) najveća ako je orbitni uglovni moment $\hat{\mathbf{l}}$ orijentisan antiparalelno sa $\mathbf{B}$. Za proton ili pozitron bilo bi obratno (zbog obratnog naboja).

Veličina $m\mu_B\hbar$ se naziva projekcijom magnetnog dipolnog momenta $\mu_B\hat{\mathbf{l}}$ na pravac magnetnog polja $\mathbf{B}$. Perturbacija je u stvari sprezanje ovog orbitnog magnetnog dipola sa spoljašnjim magnetnim poljem.

Baš od uloge koju kvantni broj m igra u Zeeman-ovom efektu, tj. od (6.8.13), i potiče naziv "magnetni" za ovaj kvantni broj.

[6.8.6] Videćemo u (9.1.23) da nivoi hamiltonijana datog sa (6.8.12b) u stvari ne zavise od l, tj. da su degenerisani po l. Ova degeneracija se prirodno uklanja kada se uzme u obzir tzv. spin-orbitno sprezanje i relativistička korekcija, tzv. fina struktura (§ 9.1.10). Za diskusiju u ovom odeljku pogodnije je uzimati nivoe iz fine strukture za E^0_{nl}.

6.8.6 Završne napomene

U ovom odeljku smo izložili tzv. *naivnu teoriju* Zeeman-ovog efekta. Naime, pokazaće se da naš model sa jednim (valentnim) elektronom bez spina ne odgovara realnosti. Formula (6.8.13) je ipak u stvari tačna ali sa potrebnim izmenama (u datoj aproksimaciji): m i $\hat{l}_z$ treba zameniti odgovarajućim mnogoelektronskim veličinama M_J odnosno $\hat{J}_z$ ($\hat{\mathbf{J}}$ je ukupni uglovni moment elektronskog omotača).

Izloženi efekat se sastoji u cepanju na neparan broj (tačno $2l+1$) energetskih nivoa. To je tzv. *normalni Zeeman-ov efekat*. Kao što ćemo videti u § 6.9.3 i u § 7.4.5, postoji i tzv. *anomalni Zeeman-ov efekat*, u kom se vrši analogno cepanje (izazvano istim magnetnim poljem $\mathbf{B}$) ali na *paran* broj nivoa.

6.9 Unutrašnji magnetni dipol i spin elektrona

U ovom odeljku izložićemo ukratko eksperimentalno-istorijski put kojim se došlo do saznanja da elementarne čestice — kao na primer elektron — imaju pored orbitnog i unutrašnji uglovni moment ili spin. Formulisaćemo sedmi postulat — Postulat o unutrašnjim stepenima slobode — kako bismo omogućili konstrukciju spinskog prostora u sledećem odeljku.

6.9.1 Uvod

Iz opšte teorije uglovnog momenta znamo da su moguće i polucele vrednosti kvantnog broja uglovnog momenta (tj. poluceli k). S druge strane, iskustvo nas uči da priroda ostvaruje sve osim što joj je zabranjeno prvim principima. Zato nas ne iznenađuje da elementarne čestice (elektroni, neutroni, njihove antičestice itd.) imaju poluceli unutrašnji uglovni moment.

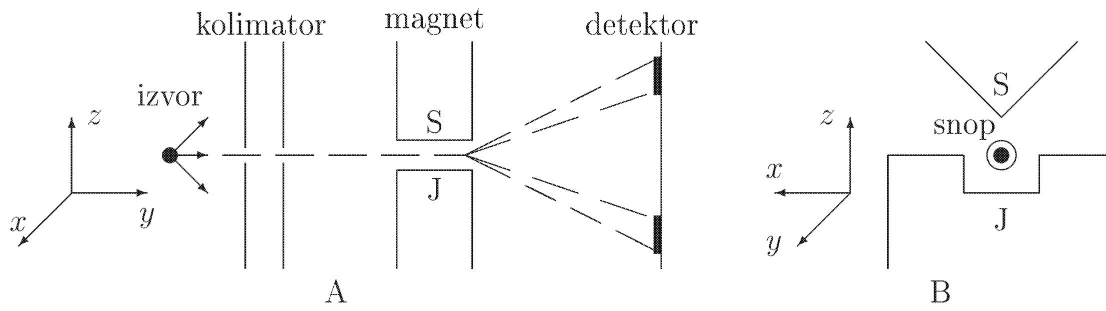
Mi smo, naravno, invertovali istorijski razvoj, kao što deduktivna teorija po pravilu čini. Teorija opšteg uglovnog momenta je istorijski došla na kraju, kao kruna jednog induktivnog idejnog razvoja uglovnog momenta i rotacija u kvantnoj mehanici. U ovom odeljku ćemo za trenutak zaboraviti opštu teoriju; imaćemo u vidu samo teoriju orbitnog uglovnog momenta koja je već bila poznata prvih godina treće decenije ovog veka kada je izvršen Stern-Gerlach-ov eksperiment.

6.9.2 Stern-Gerlach-ov eksperiment

U ovom eksperimentu snop paralelnih atoma srebra, na primer propuštenih kroz tzv. kolimator (vidi Crtež (C 6.7)), prolazi kroz nehomogeno magnetno polje u kome se cepa na dva dela. Na detektoru se pojavljuju dve mrlje Ag atoma.

O čemu se tu radi? Videli smo u naivnoj teoriji Zeeman-ovog efekta (§ 6.8) da spoljašnje magnetno polje $\mathbf{B}$ "vidi" valentni elektron koji kruži oko zatvorenih ljuski (u prvoj aproksimaciji) kao magnetni dipol (orbitni, za razliku od unutrašnjeg o kome će biti reči niže). Potencijalna energija elektrona, koji ima operator magnetnog dipolnog momenta i koji se nalazi u magnetnom polju $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ je (kao što smo videli u (6.8.10) i ispod toga):

$$V(\mathbf{r}) = -\hat{\mu}_l \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}). \tag{6.9.1}$$



Slika 6.7: **Stern-Gerlach-ov eksperiment.**

U pomenutom slučaju normalnog Zeeman-ovog efekta magnetni dipolni moment je poticao od kružnog kretanja elektrona u njegovoj atomskoj ljusci i dipolni moment se mogao napisati u vidu operatora

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = -\frac{|e|}{2m_e c}\hat{\mathbf{l}} = -\mu_B \hat{\mathbf{l}}. \tag{6.9.2}$$

Može se očekivati da u dobroj aproksimaciji i magnetno polje u Stern-Gerlach-ovom eksperimentu "vidi" Ag atom kao magnetni dipol, tj. da važi (6.9.1). Pošto je $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ nehomogeno polje, na atom srebra deluje sila $\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r})$. Magnetni polovi (S i J) su konstruisani tako da $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ ima približno homogen smer i to približno duž z-ose (u oblasti snopa), a intenzitet mu se naglo menja. Prema tome, sila koja deluje[6.9.1] je

$$\mathbf{F} \approx -\mu_B \frac{\partial B(z)}{\partial z} l_z \mathbf{z}_0, \tag{6.9.3}$$

gde je $\mathbf{z}_0$ ort z-ose (videti Crtež C 6.7).

Neutralni Ag atom ima 47 elektrona (videti Crtež C 6.7), od toga 46 popunjavaju zatvorene ljuske (ljuske inertnog kriptona i 10 elektrona u četvrtoj d, tj. $l = 2$, ljusci), a jedan valentni elektron nalazi se u s (tj. $l = 0$) stanju. U zatvorenim ljuskama se svi magnetni momenti uzajamno kompenzuju i one ne pokazuju magnetne osobine. Drugim rečima, $\mathbf{B}$ "vidi" samo magnetni dipolni moment valentnog elektrona.

Ako bi ovaj elektron bio u p stanju (tj. imao $l = 1$), (6.9.3) bi se svelo na

$$F_z \approx -\frac{|e|}{2m_e c} \cdot \frac{\partial B(z)}{\partial z} m\hbar, \quad m = -1, 0, 1, \tag{6.9.4}$$

što bi dalo tri mrlje na detektoru[6.9.2]. I svako drugo stanje bi dovelo do neparnog broja $(2l+1)$ mrlja i jedan deo snopa (koji odgovara $m = 0$) ne bi uopšte bio skrenut. Međutim, valentni

[6.9.1] U tipičnom Stern-Gerlach-ovom eksperimentu $\frac{\partial B(z)}{\partial z} \approx 250.000$gaussa/cm. Toliki stepen nehomogenosti polja je potreban da bi se dobilo makroskopsko skretanje delova snopa.

[6.9.2] Čitalac je zapazio da ponašanje čestica u magnetnom polju Stern-Gerlach-ovog uređaja opisujemo semiklasično. Naime, kada se radi o česticama dovoljno velike mase, onda se snop čestica kvantno opisuje talasnim paketom koji se vrlo sporo rasipa, tj. ponaša se kao klasična čestica. Da bismo postigli veliku masu, koristimo se atomima kao prenosiocima valentnih elektrona; sami goli elektroni bi pretrpeli specifične kvantne efekte interferencije.

elektron u atomu srebra je, kao što smo rekli, u s stanju i stoga on (kao ni zatvorene ljuske) nema orbitalni magnetni dipolni moment.

Eksperimenti sa drugim atomima sa po jednim valentnim elektronom u s stanju, kao na primer sa atomima H, Li, Na, K, takođe su dali dve mrlje na detektoru u Stern-Gerlach-ovom eksperimentu. Isto je bio slučaj i sa atomima Tl (*Thallium*), koji imaju jedan valentni elektron u p stanju (samo su tu mrlje bile bliže jedna drugoj, videti slično u slučaju Zeeman-ovog efekta, kraj § 7.4.5).

Tako je eksperimentalno bila utvrđena činjenica da elektron ima *unutrašnji magnetni dipolni moment* konstantne veličine, čiji se smer u datom magnetnom polju može orijentisati na dva načina: gore ili dole.

6.9.3 Anomalni Zeeman-ov efekat

Naporedo sa Stern-Gerlach-ovim eksperimentima unutrašnji magnetni moment elektrona u s stanju ispitivan je i putem Zeeman-ovog efekta.

Za razliku od normalnog Zeeman-ovog efekta (videti § 6.8) u ovom slučaju se energetski nivo atoma (zapravo energetski nivo valentnog elektrona) cepao na dva nivoa u analogiji sa dve mrlje u Stern-Gerlach-ovom eksperimentu, a u skladu sa pomenutom tzv. prostornom kvantizacijom (kvantizacijom orijentacije) unutrašnjeg magnetnog dipolnog momenta elektrona. To je bio primer anomalnog Zeeman-ovog efekta.

6.9.4 Hipoteza spina

Stern-Gerlach-ov eksperiment i anomalni Zeeman-ov efekat naveli su Goudsmit-a i Uhlenbeck-a (čitati: Gaudsmit i Ulenbek) 1925. godine da postave *hipotezu* postojanja *unutrašnjeg uglovnog momenta* ili tzv. *spina* kod elektrona, čiji se kvantni broj označava slovom s i ima samo jednu vrednost $s = \frac{1}{2}$ (s je realizacija od k iz § 6.2).

Na osnovu ove hipoteze, po analogiji sa (6.9.2), operator unutrašnjeg magnetnog dipolnog momenta elektrona može da se piše u vidu

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = -g_s \frac{|e|}{2m_e c}\hat{\mathbf{s}}, \tag{6.9.5}$$

gde je $\hat{\mathbf{s}}$ vektorski operator spina, a g_s tzv. giromagnetski ili Lande-ov faktor. Za elektron je u dobroj aproksimaciji $g_s = 2$, kao što se teorijski i dobija u Dirac-ovoj relativističkoj kvantnoj mehanici elektrona, a eksperimentalno se to potvrđuje[6.9.3].

Daćemo sad precizniju formu Goudsmit-Uhlenbeck-ove *hipoteze spina*:

a) Svaka kvantna čestica ima unutrašnji uglovni moment ili spin, a njegov kvantni broj s ima samo jednu i to nepromenljivu vrednost, koja je jedna od osnovnih fenomenoloških osobina čestice, naporedo sa masom, električnim nabojem itd. Kvantni broj s može biti ceo ili poluceo broj.

[6.9.3] Ispostavilo se da i proton i neutron imaju spin $s = \frac{1}{2}$, takođe važi i za njih analogon od (6.9.5): $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = -g_s \frac{|e|}{2m_p c}\hat{\mathbf{s}}$ (uporediti fusnotu 6.8.2).

b) Ako $s \neq 0$, kvantna čestica ima operator unutrašnjeg magnetnog dipolnog momenta $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = g_s \frac{q}{2mc}\hat{\mathbf{s}}$ (q je električni naboj čestice), koji se fizički ispoljava, u analogiji sa orbitnim magnetnim dipolnim momentom $\hat{\boldsymbol{\mu}}_l$, na primer kao član $-\hat{\boldsymbol{\mu}}_s \cdot \mathbf{B}$ u hamiltonijanu čestice u prisustvu konstantnog i homogenog magnetnog polja $\mathbf{B}$. Giromagnetski faktor g_s je takođe fenomenološka osobina čestice.

Treba napomenuti da može biti $s = 0$ (kao kod Π_- i K_- mezona), kada spin možemo izostaviti u formalizmu; a takođe može biti $s = 1$ kao u slučaju fotona, kvanta elektromagnetnog polja. Čestice sa polucelim spinom s nazivaju se *fermionima*, a čestice sa celim spinom *bozonima*.

Pošto u prethodnom paragrafu opisana svojstva ireducibilnih reprezentacija Galilejeve grupe predstavljaju saznanja novijeg porekla, opisani nerelativistički teorijski okvir za m i s je tek nedavno izgrađen.

Međutim, odavno je poznato da ireducibilne reprezentacije Poincare-ove grupe (relativističkog analogona Galilejeve grupe) uvode spin i masu analogno kao što smo gore opisali za Galilejevu grupu.

6.9.5 Paradoks spina

Možemo da pokušamo da formuli (6.9.5) pripišemo fizički smisao u analogiji sa formulom (6.9.2): unutrašnji dipolni magnetni moment je funkcija spina, prema tome mora da je posledica nekog rotiranja električnosti unutar elektrona oko njegove ose, analogno kao što Zemlja ima rotaciju oko ose. To bi bila još jedna realizacija *Ampére-ove hipoteze* o električno-cirkulatornom poreklu svake magnetičnosti.

Sad smo došli do paradoksa: govorimo o kruženju električnosti "unutar" elektrona, a s druge strane elektron, kao i svaku drugu česticu u nerelativističkoj kvantnoj mehanici, zamišljamo kao materijalnu tačku da bismo što jednostavnije interpretirali svojstvene vrednosti $\mathbf{r}$ opservable radijus-vektora čestice.

Videli smo u paragrafu § 4.1.6 da slobodnu česticu možemo (sa proizvoljnom približnošću) lokalizovati u tački samo po cenu neograničenog povećavanja njene kinetičke energije (zbog relacija neodređenosti između koordinate i impulsa). Vezanu česticu možemo analogno lokalizovati po cenu neograničeno velikih potencijala, koji će da kompenzuju kinetičku energiju (uporediti fusnotu 4.1.8). Sve je to ipak zamislivo u okvirima nerelativističke kvantne mehanike, ali postaje prilično nerealno. Međutim, u kvantnoj mehanici se ipak ostaje pri pomenutoj iluziji materijalne tačke.

Bilo je pokušaja da se elementarne čestice tretiraju kao da ispunjavaju izvesnu zapreminu i kao da imaju unutrašnju strukturu, ali ovi pokušaji nisi naišli na širi prijem kod kvantnih fizičara, ako ništa drugo, već i zbog složenosti modela koji predlažu[6.9.4].

U preostala dva paragrafa ćemo videti na koji način se ideja unutrašnjeg porekla dipolnog momenta $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s$ realizuje u kvantnoj mehanici. To se čini na jedan apstraktan i formalan način u kom bi Ampére teško prepoznao realizaciju svoje pomenute hipoteze.

[6.9.4] Eksperimenti rasejanja elektrona koje je vršio američki fizičar Hofstadter sa svojom ekipom pokazali su da na primer proton i neutron zapremaju konačne volumene. Po svoj prilici, nijedna elementarna čestica nije tačno materijalna tačka. Kvantna mehanika tu čini jedno pojednostavljenje, idealizaciju. Možda će se u budućnosti uneti veća rezolucija u njenu interpretaciju.

6.9.6 Postulat o unutrašnjim stepenima slobode čestice

Postulat o kvantizaciji klasičnih varijabli omogućio nam je u odeljcima § 2.5 i § 2.6 da konstruišemo orbitni prostor stanja $\mathcal{H}_o$ čestice. Sad je došlo vreme da se zapitamo da li je ovaj prostor dovoljno bogat (kvantno-mehaničkom strukturom) da se u njemu izraze sve moguće kvantno-mehaničke osobine čestica. Već smo u § 2.6.6 u stvari dali negativan odgovor na ovo pitanje ukazavši na činjenicu prilične raznovrsnosti kvantnih čestica, a s druge strane $\mathcal{H}_o$ je jedan te isti. U ovom odeljku se postavlja pitanje da li se konkretno $\hat{\mu}_s$ može definisati u $\mathcal{H}_o$.

Pre svega se mora regulisati logički status proširenja $\mathcal{H}_o$.

VII POSTULAT O UNUTRAŠNJIM STEPENIMA SLOBODE

Svaka kvantna čestica ima pored orbitnih i unutrašnje stepene slobode, koji ulaze u formalizam kvantne mehanike preko jednog ili više faktor prostora sa kojima se $\mathcal{H}_o$ množi direktno.

U odeljku § 2.6 smo videli da se direktni proizvod faktor prostora stanja pojavljuje kao prirodan način da se u formalizmu izrazi kompozicija materijalnih podsistema, tj. na primer prelazak sa dve pojedinačne čestice na dvočestični sistem. Postulat VII ovu ideju proširuje[6.9.5] i na nematerijalne podsisteme: na tzv. kinematičke stepene slobode[6.9.6].

Kinematički stepeni slobode dele se na orbitne i na unutrašnje. U orbitne spada kako ceo $\mathcal{H}_o$, tako i njegovi faktori $\mathcal{H}_q$, $q = x, y, z$ ili $\mathcal{H}_r$, $\mathcal{H}_\theta$, $\mathcal{H}_\varphi$. Sa gledišta kvantne mehanike prvi i najvažniji unutrašnji stepen slobode je spinski. Njegovom detaljnom izlaganju u $s = \frac{1}{2}$ posvećen je sledeći odeljak. Neke druge unutrašnje stepene slobode, kao što su izospin i SU(3) simetrija, opisaćemo u odeljcima § 8.5, odnosno § 8.6. Ovo pitanje se detaljnije izučava u kursu posvećenom isključivo elementarnim česticama.

Kao što smo opisali, istorijski je spin ušao u kvantnu mehaniku putem hipoteze bazirane na rezultatima Stern-Gerlach-ovog eksperimenta i anomalnog Zeeman-ovog efekta. Međutim, u savremenom deduktivnom prilazu kvantne mehanike, kakvom je ovaj udžbenik posvećen, pojavljivanje spina omogućuje Postulat o unutrašnjim stepenima slobode.

Pomenuti Postulat izriče nužnost bar nekog unutrašnjeg stepena slobode, ali što se tiče samog spina, samo otvara mogućnost njegove pojave. Nužnost uvođenja spina teorijski potiče od ireducibilnih reprezentacija Galilejeve grupe. Naime, u teoriji reprezentacija Galilejeve grupe (i odgovarajuće Lie-jeve algebre — u suštini osnovnog skupa opservabli $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ u $\mathcal{H}_o$) pokazuje se da svaku ireducibilnu reprezentaciju karakterišu dva kvantna broja. Prvi može imati vrednost bilo kog nenegativnog broja i interpretira se kao masa čestice, a drugi ima celu ili polucelu nenegativnu vrednost i po svojoj vezi sa rotacionom grupom R(3) jasno je da je to upravo naš

[6.9.5] Čitaocu koji je već malo upućen u kvantnu fiziku može se učiniti da bi postulat VII trebalo samo da dozvoli mogućnost — a ne da zahteva nužno — unutrašnje stepene slobode čestica. Međutim, pogled na tabelu Tb 8.1 osnovnih hadrona pokazuje da tu nemamo čestice bez unutrašnjih stepena slobode. Mezoni, na primer, nemaju spin (tj. $s = 0$), ali imaju izospin. Što se tiče leptona (tj. lakih čestica kao što su elektron, μ-mezon i njihove antičestice; neutrina), to su sami fermioni sa spinom $s = \frac{1}{2}$.

[6.9.6] Dok su kinematički stepeni slobode karakterisani direktnom faktorizacijom prostora stanja, dinamički stepeni slobode, nasuprot tome, definisani su samo pojedinim članovima u hamiltonijanu kvantnog sistema. Tu spadaju na primer rotacioni stepen slobode (videti kruti rotator u § 10.1.5), vibracioni itd.

spin s. Videti, na primer, drugu referencu u fusnoti 5.1.4). Teorija ireducibilnih reprezentacija Galilejeve grupe je previše složena za elementaran kurs kao što je ovaj.

Teorijsko poreklo spina je noviji rezultat. Odavno je poznato da ireducibilne reprezentacije Poincare-ove grupe (relativističkog analogona Galilejeve grupe) uvode spin i masu analogno kao što smo opisali.

6.10 Formalizam spina $s = \frac{1}{2}$

Ovaj odeljak ćemo posvetiti detaljnom izlaganju Pauli-jeve teorije elektrona, kako se ponekad naziva formalizam spina $s = \frac{1}{2}$. Konstruisaćemo spinski faktor prostor stanja $\mathcal{H}_s$ na osnovu vektorske opservable spina $\hat{\mathbf{s}}$. Proučićemo standardni bazis u $\mathcal{H}_s$, matrice koje reprezentuju vektorski operator spina i spinske rotacije u tom bazisu. Upoznaćemo se sa tom drugom (ekvivalentnom) varijantom spinskog formalizma: sa dvokomponentnim talasnim funkcijama. Na kraju, objasnićemo ideju heliciteta.

6.10.1 Čestice spina $s = \frac{1}{2}$

Ukupni prostor stanja čestice sa unutrašnjim magnetnim dipolnim momentom ima u Pauli-jevoj teoriji dva direktna faktora:

$$\boxed{\mathcal{H}_u = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s}. \tag{6.10.1}$$

Prvi faktor je orbitni prostor stanja, a drugi faktor je tzv. *spinski prostor* od $2s + 1$ dimenzija u opštem slučaju.

Spinski kvantni broj s je $\frac{1}{2}$ ne samo za elektron, već i za proton, neuton, pozitron, antiproton, antineutron, za Λ i Σ hiperone itd. Dakle, tu spadaju najvažnije elementarne čestice elektron i proton, koje su potpuno stabilne (tj. ne pretvaraju se u drugu elementarnu česticu) i služe kao osnovne ciglice za izgradnju elektronskih omotača atoma, odnosno jezgara i preko njih svih materijalnih tela. Neutron nije stabilan kad je slobodan, raspada se na proton, elektron i na elektronov antineutrino. U vezanom stanju u jezgru neutron postaje stabilan i stoga predstavlja treću najvažniju elementarnu česticu sveta, a takođe ima spin $s = \frac{1}{2}$.

Kao što je već rečeno, čestice sa polucelim spinom s nazivaju se *fermioni*. Čestice čiji je spin ceo broj nazivaju se *bozoni*. Najvažniji bozoni su (bezmaseni) kvanti elektro-magnetnog zračenja, tzv. fotoni, čiji je spin, pojednostavljeno rečeno, $s = 1$ (u stvari imamo ili $z_z = 1$ — foton sa desnim *helicitetom* ili $s_z = -1$ — levi helicitet; vrednost $s_z = 0$ zbog relativističkih razloga nije moguća). Nazivi "fermion" i "bozon" potiču od činjenice da se ove čestice opisuju različitim statistikama: Fermi-Dirac-ovom fermioni, odnosno Bose-Einstein-ovom bozoni ("Bose" treba čitati: Bouz). Videti o ovome detaljnije u § 9.3.6.

6.10.2 Spinski faktor prostor i standardni bazis

U ovom odeljku ograničavamo se na najvažniji specijalni slučaj spina $s = \frac{1}{2}$. Spinski faktor prostor definišemo kao apstraktni Hilbert-ov prostor i zbog toga možemo naše rezultate za opšti uglovni moment $\hat{\mathbf{K}}$ neposredno da specifikujemo na ovaj slučaj pišući $\hat{\mathbf{s}}$ za vektorski operator spina (umesto $\hat{\mathbf{K}}$ iz § 6.1 do § 6.4).

Po definiciji, komponente vektorske opservable spina $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$ i $\hat{s}_z$ čine *osnovni skup opservabli u* $\mathcal{H}_s$. U tom prostoru $\hat{s}_z$ (ili umesto nje $\hat{s}_x$ ili $\hat{s}_y$) je *kompletna opservabla*. Stoga u standardnom bazisu u vektorima $|\,km\lambda\,\rangle$ ne samo da λ nije potrebno, nego ne moramo pisati ni $k = s = \frac{1}{2}$ (to je karakteristika samog $\mathcal{H}_s$). Standardni bazis u $\mathcal{H}_s$ pišemo prosto u vidu

$$\{|\,+\,\rangle, |\,-\,\rangle\}, \tag{6.10.2}$$

označavajući kratko sa "+" $m_s = \frac{1}{2}$, a sa "-" $m_s = -\frac{1}{2}$.

Zahtev da je $\hat{\mathbf{s}}$ osnovni skup opservabli u $\mathcal{H}_s$ ima za posledicu da je $\mathcal{H}_s$ ireducibilan za $\hat{\mathbf{s}}$ (uporediti § 2.5.3). Na jeziku "ormara sa fiokama" (C 6.2), $\mathcal{H}_s$ se sastoji od jedne jedine kolone dužine $2s + 1 = 2$.

Zadatak 6.10.1 Prodiskutovati analogiju između konstrukcije $\mathcal{H}_o$ iz zahteva da je $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$ osnovni skup opservabli u njemu (§ 2.5 i § 2.6) i opisane konstrukcije prostora $\mathcal{H}_s$.

6.10.3 Pauli-jeve matrice

Kada $\hat{\mathbf{s}}$ reprezentujemo u standardnom bazisu (6.10.2), opšte jednakosti (6.3.10)-(6.3.12) daju za matrice $\mathbf{s}$:

$$(s_z)_{m_s,m_s'} = \delta_{m_s,m_s'} m_s \hbar, \tag{6.10.3a}$$

$$(s_x)_{m_s,m_s'} = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{3}{4} - m_s m_s'}(\delta_{m_s,m_s'+1} + \delta_{m_s,m_s'-1}), \tag{6.10.3b}$$

$$(s_y)_{m_s m_s'} = \frac{1}{2\imath}\hbar\sqrt{\frac{3}{4} - m_s m_s'}(\delta_{m_s,m_s'+1} - \delta_{m_s,m_s'-1}). \tag{6.10.3c}$$

Takozvane Pauli-jeve matrice $\boldsymbol{\sigma} \stackrel{\text{def}}{=} \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ su definisane sledećom vektorskom matričnom jednakošću:

$$\mathbf{s} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\hbar. \tag{6.10.4}$$

Zadatak 6.10.2 Pokazati da se (6.10.3a)-(6.10.3c) svode na

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\imath \\ \imath & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.10.5}$$

Zadatak 6.10.3 a) Objasniti kako je moguće da je matrična reprezentacija $\mathbf{s}$ operatora $\hat{\mathbf{s}}$ jednoznačna iako je standardni bazis definisan nejednoznačno. b) Provesti analognu diskusiju za opšti uglovni moment.

Zadatak 6.10.4 Pokazati da Pauli-jeve matrice zadovoljavaju sledeće specijalne relacije:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \tag{6.10.6}$$

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = \imath\sigma_z, \quad \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = \imath\sigma_x, \quad \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = \imath\sigma_y, \tag{6.10.7}$$

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = \imath, \tag{6.10.8}$$

$$\mathrm{Tr}\,\sigma_x = \mathrm{Tr}\,\sigma_y = \mathrm{Tr}\,\sigma_z = 0, \tag{6.10.9}$$

$$\det\sigma_x = \det\sigma_y = \det\sigma_z = -1. \tag{6.10.10}$$

Relacije (6.10.7) znače da dve različite Pauli-jeve matrice antikomutiraju:

$$[\,\sigma_q, \sigma_{q'}\,]_+ = \{\sigma_q, \sigma_{q'}\} \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_q\sigma_{q'} + \sigma_{q'}\sigma_q = 0, \quad q \neq q', \quad q, q' = x, y, z. \tag{6.10.11}$$

6.10.4 Spinske rotacije

Što se tiče rotacija u spinskom faktor prostoru $\mathcal{H}_s$, ili preciznije, što se tiče unitarnih operatora $\hat{U}_s(\phi\mathbf{u})$ koji su u $\mathcal{H}_s$ reprezentanti rotacija $R_{\phi\mathbf{u}}$ u običnom prostoru, oni su dati sa

$$\hat{U}_s(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{s}}}, \quad \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}, \tag{6.10.12}$$

kao što neposredno sledi primenom opšte formule date u Stavu S 6.4.1. U standardnom bazisu (6.10.2) matrični reprezentant možemo da pišemo na osnovu (6.10.4) u vidu

$$U_s(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{\imath}{2}\phi\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\sigma}}. \tag{6.10.13}$$

Zadatak 6.10.5 Pokazati da projekcija vektorske Pauli-jeve matrice $\boldsymbol{\sigma}$ na proizvoljan ort $\mathbf{u}$, tj.

$$\sigma_u \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\sigma} = u_x\sigma_x + u_y\sigma_y + u_z\sigma_z \tag{6.10.14}$$

($\mathbf{u}$ je brojni vektor), ima sledeći vid:

$$\sigma_u = \begin{pmatrix} u_z & u_x - \imath u_y \\ u_x + \imath u_y & -u_z \end{pmatrix}, \tag{6.10.15}$$

i sledeće osobine:

$$\sigma_u^{2p} = I, \quad p = 1, 2, ...; \quad \sigma_u^{2p+1} = \sigma_u, \quad p = 0, 1, ..., \tag{6.10.16}$$

gde je I jedinična 2×2 matrica.

Zadatak 6.10.6 Pokazati da se (6.10.13) svodi na

$$\boxed{U_s(\phi\mathbf{u}) = \cos\frac{\phi}{2} - \imath\sigma_u\sin\frac{\phi}{2}, \quad \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}}. \tag{6.10.17}$$

(Indikacija: Poći od definicije eksponencijalne funkcije preko reda i iskoristiti formule $\cos\phi = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{\phi^{2n}}{(2n)!}$, $\sin\phi = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{\phi^{2n+1}}{(2n+1)!}$.)

Na prvi pogled izgleda da (6.10.17) daje jednoznačno matricu rotacije za svaki element π-lopte. Međutim, kad se setimo da $\pi\mathbf{u}$ i $\pi(-\mathbf{u})$, za svako $\mathbf{u}$, definišu isti element π-lopte (i istu rotaciju), moramo proveriti da li te dve tačke daju istu matricu preko (6.10.17).

Zadatak 6.10.7 Pokazati da važi

$$U_s(\pi\mathbf{u}) = -\imath\sigma_u, \quad \forall\mathbf{u}, \tag{6.10.18}$$

$$U_s(\pi(-\mathbf{u})) = -\imath\sigma_u = -U_s(\pi\mathbf{u}), \quad \forall\mathbf{u}. \tag{6.10.19}$$

Iz (6.10.19) vidimo da elementu $\{\pi\mathbf{u}, \pi(-\mathbf{u})\}$ π-lopte odgovaraju dve matrice: $\pm U_s(\phi\mathbf{u})$. Pošto $R_{\phi\mathbf{u}} = R_{(\pi-\phi)(-\mathbf{u})}R_{\pi\mathbf{u}}$ za svako $\phi\mathbf{u}$ iz π-lopte, a pridruživanje operatora $\hat{U}_s(\phi\mathbf{u})$ ili matrice $U_s(\phi\mathbf{u})$ klasičnim rotacijama je homomorfizam[6.10.1] (uporediti Stav S 6.4.1), $U_s(\phi\mathbf{u}) = U_s((\pi-\phi)(-\mathbf{u}))U_s(\pi\mathbf{u})$ i očigledno je da ne možemo izbeći *dvoznačnost* matrične reprezentacije $U_s(\phi\mathbf{u})$.

[6.10.1] Mi smo u Stavu S 6.4.1 i fusnoti 6.4.1 govorili o "homomorfizmu s tačnošću do znaka". Ali ako zamislimo da klasičnoj rotaciji $R_{\phi\mathbf{u}}$ pridružujemo skup od dve matrice $\pm U_s(\phi\mathbf{u})$ i definišemo množenje tih skupova preko predstavnika: $(\pm U_s(\phi\mathbf{u}))(\pm U_s(\psi\mathbf{v})) = \pm U_s(\phi\mathbf{u})U_s(\psi\mathbf{v})$, onda u stvari imamo pravi homomorfizam.

6.10.5 Euler-ovi uglovi i pojam spinora

Kao što smo videli u paragrafu § 6.1.5, rotacija u običnom prostoru može biti zadata sa tri Euler-ova ugla umesto elementom π-lopte. Ako jednakost (6.1.8), koja glasi $R[\alpha,\beta,\gamma] = R_{\alpha\mathbf{z}_0}R_{\beta\mathbf{y}_0}R_{\gamma\mathbf{z}_0}$, reprezentujemo matricama rotacija, dolazimo do jednakosti:

$$U_s(\alpha,\beta,\gamma) = U_s(\alpha\mathbf{z}_0)U_s(\beta\mathbf{y}_0)U_s(\gamma\mathbf{z}_0). \qquad (6.10.20)$$

Pošto je interval definisanosti Euler-ovih uglova $0 \leq \alpha < 2\pi$, $0 \leq \beta \leq \pi$, $0 \leq \gamma < 2\pi$, da bismo korektno prešli na elemente π-lopte, definišemo

$$\alpha' \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \alpha, & \alpha \leq \pi \\ \alpha - 2\pi, & \alpha > \pi \end{cases}, \quad \gamma' \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \gamma, & \gamma \leq \pi \\ \gamma - 2\pi, & \gamma > \pi \end{cases}, \qquad (6.10.21)$$

onda (6.10.20) možemo da prepišemo preciznije kao

$$U_s(\alpha,\beta,\gamma) = U_s(\alpha'\mathbf{z}_0)U_s(\beta\mathbf{y}_0)U_s(\gamma'\mathbf{z}_0), \qquad (6.10.22)$$

pri čemu se "$-$" u (6.10.21) odnosi na odgovarajući ort u (6.10.22) (npr., pod $(\alpha - 2\pi)\mathbf{z}_0$ podrazumevamo $(2\pi - \alpha)(-\mathbf{z}_0)$). Formula (6.10.17) zamenjena u (6.10.22) onda daje:

$$U_s(\alpha,\beta,\gamma) = (\cos\frac{\alpha'}{2} - \imath\sigma_z\sin\frac{\alpha'}{2})(\cos\frac{\beta}{2} - \imath\sigma_y\sin\frac{\beta}{2})(\cos\frac{\gamma'}{2} - \imath\sigma_z\sin\frac{\gamma'}{2}) \qquad (6.10.23)$$

(ukoliko se u (6.10.21) uzima druga alternativa sa minusom napisana, onda se u (6.10.23) "$\imath$" zamenjuje da "$-\imath$", kao što odmah sledi iz (6.10.15)).

Zadatak 6.10.8 Pokazati da se (6.10.23) svodi na sledeću matricu kojoj je jednaka $U_s(\alpha,\beta,\gamma)$:

$$\begin{pmatrix} e^{-\imath\frac{\alpha'}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{-\imath\frac{\gamma'}{2}} & -e^{-\imath\frac{\alpha'}{2}}\sin\frac{\beta}{2}e^{\imath\frac{\gamma'}{2}} \\ e^{\imath\frac{\alpha'}{2}}\sin\frac{\beta}{2}e^{-\imath\frac{\gamma'}{2}} & e^{\imath\frac{\alpha'}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{\imath\frac{\gamma'}{2}} \end{pmatrix} \qquad (6.10.24)$$

(naravno i ovde se "$\imath$" zamenjuje sa "$-\imath$" pored α' ili γ' ako važi druga alternativa u (6.10.21)).

Grupa svih rotacija u $\mathcal{H}_s$ (bez obzira na izbor Lie-jevih parametara) je tzv. *spinorna* (ili $k = \frac{1}{2}$) ireducibilna reprezentacija grupe R(3). Pošto operatori $\hat{U}_s(\phi\mathbf{u})$ ostvaruju rotacije u prostoru $\mathcal{H}_s$, i sami vektorima iz $\mathcal{H}_s$ su specijalni entiteti nazvani *spinori*. U stvari, oni su po definiciji nosioci spinorne reprezentacije. U reprezentaciji standardnog bazisa (6.10.2), spinori su dvočlane brojne kolone (elementi iz $\mathbf{C}^2$), a rotiramo ih primenom matrica $U_s(\phi\mathbf{u})$ datih sa (6.10.17) ili matrica $U_s(\alpha,\beta,\gamma)$ definisanih sa (6.10.24).

6.10.6 * Matematički podsetnik — direktni proizvod Hilbert-ovih prostora i supervektori

Pošto su vektori koji opisuju stanja elektrona elementi kompozitnog prostora $\mathcal{H}_u = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$, postoji više načina kako se mogu pisati vektori stanja i operatori koji deluju na njih. Da bismo to bolje mogli da shvatimo, počnimo sa devijacijom u matematiku i rezimirajmo relevantne pojmove i stavove iz teorije direktnih proizvoda Hilbert-ovih prostora.

Neka je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ i neka su $\{|\, m_1 \rangle | \forall m_1\}$ i $\{|\, n_2 \rangle | \forall n_2\}$ bazisi u respektivnim faktor prostorima. Onda je $\{|\, m_1 \rangle \,|\, n_2 \rangle | \forall m_1, \forall n_2\}$ $(|\, m_1 \rangle \,|\, n_2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\, m_1 \rangle \otimes |\, n_2 \rangle)$ bazis u $\mathcal{H}$ i proizvoljan kompozitni vektor $|\, \psi \rangle\rangle \in \mathcal{H}$ možemo jednoznačno da razvijemo u red po tom bazisu (uporediti § 2.6.3):

$$|\, \psi \rangle\rangle = \sum_{m_1 n_2} \psi_{m_1 n_2} \,|\, m_1 \rangle \,|\, n_2 \rangle, \tag{6.10.25}$$

gde su $\psi_{m_1 n_2}$ kompleksni brojevi, tzv. koeficijenti razvijanja (6.10.25). Naravno, $\|\, |\, \psi \rangle\rangle \|^2 \stackrel{\text{def}}{=} \langle\langle\, \psi \,|\, \psi \rangle\rangle = \sum_{m_1 n_2} |\psi_{m_1 n_2}|^2 < \infty$.

Pošto je red (6.10.25) apsolutno konvergentan, možemo sabirke da pregrupišemo po volji. Za nas je od važnosti jedino preuređenje koje, uz korišćenje linearnosti i neprekidnosti prvog faktora daje:

$$|\, \psi \rangle\rangle = \sum_{n_2} \Big(\sum_{m_1} \psi_{m_1 n_2} \,|\, m_1 \rangle \Big) \,|\, n_2 \rangle. \tag{6.10.26}$$

Obeležimo sa $\langle\, n_2 \,|\, \psi \rangle\rangle$ vektor u maloj zagradi:

$$\langle\, n_2 \,|\, \psi \rangle\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{m_1} \psi_{m_1 n_2} \,|\, m_1 \rangle \in \mathcal{H}_1, \quad \forall n_2. \tag{6.10.27}$$

Kao što i naša notacija sugeriše, može da se pokaže da vektor $\langle\, n_2 \,|\, \psi \rangle\rangle \in \mathcal{H}_1$ ne zavisi od izbora bazisa $\{|\, m_1 \rangle | \forall m_1\}$ u $\mathcal{H}_1$ (već samo od $|\, \psi \rangle\rangle$ i $|\, n_2 \rangle$). Vektor $\langle\, n_2 \,|\, \psi \rangle\rangle$ se naziva *parcijalni skalarni proizvod*. On, za razliku od običnog (ili potpunog) skalarnog proizvoda, ne daje broj već vektor u $\mathcal{H}_1$. Mi smo ovu operaciju već upoznali u § 4.4.5.

Ako zamenimo (6.10.27) u (6.10.26) dobićemo

$$\boxed{|\, \psi \rangle\rangle = \textstyle\sum_{n_2} \langle\, n_2 \,|\, \psi \rangle\rangle \otimes |\, n_2 \rangle}. \tag{6.10.28}$$

Formula (6.10.28) predstavlja *razvijanje* kompozitnog vektora $|\, \psi \rangle\rangle$ *po parcijalnom bazisu* (po bazisu samo u jednom faktor prostoru). Ono je jednoznačno. U § 4.4.4 videli smo da razvijanje $|\, \psi \rangle\rangle$ po parcijalnom bazisu koji je svojstveni bazis redukovanog statističkog operatora $\hat{\rho}_2$ od $|\, \psi \rangle\rangle$ daje Schmidt-ovu kanoničnu formu za $|\, \psi \rangle\rangle$ (značajnu za kvantne korelacije sadržane u $|\, \psi \rangle\rangle$).

Kao što je dobro poznato, vektori iz $\mathcal{H}_2$ na osnovu razvijanja po bazisu $\{|\, n_2 \rangle | \forall n_2\}$ reprezentuju se brojnim kolonama (mesto u koloni pokazuje pored kog bazisnog vektora stoji dotični broj kao koeficijent razvijanja). Analogno ovome, na osnovu parcijalnog razvijanja (6.10.28), možemo umesto $|\, \psi \rangle\rangle$ da pišemo kolonu vektora iz $\mathcal{H}_1$,

$$|\, \psi \rangle\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} \langle\, n_2 = 1 \,|\, \psi \rangle\rangle \\ \langle\, n_2 = 2 \,|\, \psi \rangle\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{6.10.29}$$

i pri tome je broj vektora u koloni, naravno, jednak broju bazisnih vektora u $\mathcal{H}_2$, tj. broju dimenzija $\mathcal{H}_2$. Pridruživanje (6.10.29) je tzv. *parcijalna reprezentacija* kompozitnih vektora.

Kolone vektora iz $\mathcal{H}_1$, tzv. *supervektori* na $\mathcal{H}_1$, čine sa svoje strane Hilbert-ov prostor sa skalarnim proizvodom koji je dat na sledeći način:

$$\left(\begin{pmatrix} |\, \psi_1^{(1)} \rangle \\ |\, \psi_1^{(2)} \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} |\, \phi_1^{(1)} \rangle \\ |\, \phi_1^{(2)} \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \right) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_p \langle\, \psi_1^{(p)} \,|\, \phi_1^{(p)} \rangle, \tag{6.10.30}$$

gde donji indeks ukazuje na pripadnost faktor prostoru $\mathcal{H}_1$, a gornji indeks prebrojava vektore u koloni. Na DS-i od (6.10.30) imamo skalarne proizvode u $\mathcal{H}_1$.

Čitaocu je iz (6.10.30) bez sumnje jasno da je prebrojivo beskonačna kolone vektora iz $\mathcal{H}_1$ element Hilbert-ovog prostora ako i samo ako je suma reda koji predstavlja kvadrat njene norme konačan broj.

Pridruživanje (6.10.29) je *izomorfizam* kompozitnog prostora $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ na Hilbert-ov prostor supervektora na $\mathcal{H}_1$.

Zadatak 6.10.9 Pokazati da Hilbert-ov prostor supervektora jedna realizacija od $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. (Indikacija: pokazati da su zadovoljene aksiome tenzorskog proizvoda.)

Stav 6.10.1 *Neka je $\hat{A} = \hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2$ operator u kompozitnom prostoru, a $\hat{A}_1$ i $\hat{A}_2$ deluju u faktor prostorima $\mathcal{H}_1$ odnosno $\mathcal{H}_2$. Neka je, osim toga, A_2 matrica koja u proizvoljnom datom bazisu $\{n_2|\forall n_2\}$ u $\mathcal{H}_2$ reprezentuje $\hat{A}_2$. Operator $\hat{A}$ u Hilbert-ovom prostoru supervektora na $\mathcal{H}_1$ koji je po izomorfizmu (6.10.29) ekvivalentan (tj. jednako deluje) operatoru $\hat{A} = \hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2$ u $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ (pomenuta dva ekvivalentna operatora označavamo jednako) sastoji se u sledećem preslikavanju:*

$$\hat{A} \begin{pmatrix} \mid \psi_1^{(1)} \rangle \\ \mid \psi_1^{(2)} \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} \hat{A}_1 \mid \psi_1^{(1)} \rangle \\ \hat{A}_1 \mid \psi_1^{(2)} \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{6.10.31}$$

Obratiti pažnju da je u (6.10.31) A_2 kvadratna, tj. $N_2 \times N_2$ (gde je $N_2 \stackrel{\text{def}}{=} \dim\mathcal{H}_2$) matrica kompleksnih brojeva i ona se množi (kao što se množe matrice) kolonom od N_2 vektora $\hat{A}_1 \mid \psi_1^{(p)} \rangle$ iz $\mathcal{H}_1$. Rezultat je kolona od N_2 linearnih kombinacija (ili redova) od vektora iz $\mathcal{H}_1$.

Pošto faktor prostori $\mathcal{H}_1$ i $\mathcal{H}_2$ igraju *a priori* simetrične uloge, u svemu rečenom može se uzajamno zameniti uloga ova dva prostora.

6.10.7 * Dvokomponentne talasne funkcije

U ukupnom Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}_u = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$ kvantne čestice osnovni skup opservabli je $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$, $\hat{\mathbf{s}}$. Najčešće korišćeni potpuni skup opservabli je $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{s}_z$. Odgovarajuća, tzv. koordinatno (ili radijus-vektorsko) spinska, reprezentacija daje *talasne funkcije sa spinom*:

$$\psi(\mathbf{r}, m_s) \stackrel{\text{def}}{=} \langle \mathbf{r} \mid \langle\, m_s \mid \psi \rangle\rangle, \quad \mid \psi\rangle\rangle \in \mathcal{H}_u, \tag{6.10.32}$$

za koje se skalarni proizvod računa po formuli

$$(\psi, \phi) = \sum_{m_s} \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, m_s)\phi(\mathbf{r}, m_s). \tag{6.10.33}$$

Umesto talasnih funkcija sa spinom (6.10.32), često se standardni bazis $\{\mid +\rangle, \mid -\rangle\}$ u $\mathcal{H}_s$ koristi za parcijalno reprezentovanje $\mid \psi\rangle\rangle \in \mathcal{H}_u$. Tako se dobije supervektor na $\mathcal{H}_o$ (specijalni slučaj (6.10.29)):

$$\mid \psi\rangle\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} \langle + \mid \psi\rangle\rangle \\ \langle - \mid \psi\rangle\rangle \end{pmatrix}, \tag{6.10.34}$$

$\langle\, m_s \mid \psi\rangle\rangle \in \mathcal{H}_o$, $m_s = \pm\frac{1}{2}$. Na jeziku parcijalne reprezentacije (6.10.34), skalarni proizvod u ukupnom Hilbert-ovom prostoru čestica postaje

$$\langle\langle\, \psi \mid \phi\rangle\rangle = \sum_{m_s} \langle\langle\, \psi \mid m_s\rangle\langle\, m_s \mid \phi\rangle\rangle. \tag{6.10.35}$$

Kao što je to obično slučaj u Dirac-ovoj notaciji, DS od (6.10.35) može da se interpretira na dva načina:

1) $\langle\langle\, \psi \mid m_s\rangle$ je bra od keta $\langle\, m_s \mid \psi\rangle\rangle \in \mathcal{H}_o$ i $\langle\langle\, \psi \mid m_s\rangle\langle\, m_s \mid \phi\rangle\rangle$ je skalarni proizvod u $\mathcal{H}_o$ (uporediti (6.10.30));

2) sabirak $\langle\langle\, \psi \mid m_s\rangle\langle\, m_s \mid \phi\rangle\rangle$ je matrični element projektora $\hat{I}_o \otimes \mid m_s\,\rangle\langle m_s \mid$. Pošto je $\sum_{m_s} \hat{I}_o \otimes \mid m_s\,\rangle\langle m_s \mid = \hat{I}_o \otimes \sum_{m_s} \mid m_s\,\rangle\langle m_s \mid = \hat{I}_o \otimes \hat{I}_s = \hat{I}$, DS od (6.10.35) se u ovoj interpretaciji svodi na $\langle\langle\, \psi \mid \phi\rangle\rangle$, tj. na skalarni proizvod u ukupnom prostoru $\mathcal{H}_u$ čestice.

Uobičajeno je vektore $\langle\, m_s \mid \psi\rangle\rangle \in \mathcal{H}_o$ u (6.10.34) pisati u $\mathbf{r}$-reprezentaciji, tj. preći sa $\mathcal{H}_o$ na $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$. Tako dolazimo do

$$\mid \psi\rangle\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \tag{6.10.36}$$

gde je

$$\psi_\pm(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \langle \mathbf{r} \mid \langle\, m_s = \pm 1/2 \mid \psi\rangle\rangle = \psi(\mathbf{r}, m_s = \pm 1/2). \tag{6.10.37}$$

Skalarni proizvod se pretvara u sledeći izraz

$$\langle\langle\, \psi \mid \phi\rangle\rangle = \int d\mathbf{r} \psi_+^*(\mathbf{r})\phi_+(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \psi_-^*(\mathbf{r})\phi_-(\mathbf{r}). \tag{6.10.38}$$

Talasne funkcije sa spinom, $\psi(\mathbf{r}, m_s)$, kada se prepišu kao dvočlane kolone (6.10.36), nazivaju se *dvokomponentnim talasnim funkcijama.*

Iz gornjeg stava sledi da se dvokomponentne talasne funkcije rotiraju po formuli

$$\hat{U}_s(\phi\mathbf{u}) \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = U_s(\phi\mathbf{u}) \begin{pmatrix} \psi_+(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}) \\ \psi_-(R^{-1}(\phi\mathbf{u})\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \tag{6.10.39}$$

(uporediti (6.10.31) i (6.7.2)); matrica $U_s(\phi\mathbf{u})$ data je sa (6.10.17).

Imajući u vidu (6.10.39), dvokomponentne talasne funkcije čestice spina $\frac{1}{2}$ se često nazivaju i spinornim talasnim funkcijama, ponekad čak i spinornim poljima.

6.10.8 * Helicitetne reprezentacije

Kao što je rečeno u prethodnom paragrafu, u ukupnom prostoru stanja $\mathcal{H}_u = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$ čestice najčešće se koristi koordinatno spinska reprezentacija, koju definiše potpuni skup kompatibilnih opservabli $\hat{\mathbf{r}}, \hat{s}_z$. Ponekad se koristi analogna impulsno spinska reprezentacija, koju definiše potpuni skup $\hat{\mathbf{p}}, \hat{s}_z$. U ovoj reprezentaciji apstraktne vektore $\mid \psi\rangle\rangle \in \mathcal{H}_u$ predstavljamo funkcijama $\psi(\mathbf{p}, m_s)$, ili pak prelazimo na supervektore na $\mathcal{L}^2(\mathbf{p})$:

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Postoji i mogućnost da se vektorski operator $\hat{\mathbf{s}}$ projektuje ne na fiksirani pravac kao što je z-osa, već npr. na tekući radijus vektor $\mathbf{r}$. Neka je $\mathbf{r}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$ ort od $\mathbf{r}$, a

$$\hat{s}_{\mathbf{r}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r}_0 \cdot \hat{\mathbf{s}} \qquad (6.10.40)$$

neka je opservabla dobijena projektovanjem $\hat{\mathbf{s}}$ na $\mathbf{r}_0$. Onda kao potpuni skup opservabli u $\mathcal{H}_u$ možemo uzeti $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{s}_{\mathbf{r}}$, mada je $\{\hat{s}_{\mathbf{r}}|\forall \mathbf{r}_0\}$ u stvari familija opservabli. Naime, kao bazis u $\mathcal{H}_u$ koji ovaj potpuni skup definiše uzima se

$$\{|\,\mathbf{r}\,\rangle \otimes |\, m_s(\mathbf{r})\,\rangle | \forall \mathbf{r}, m_s(\mathbf{r}) = -s, -s+1, ..., s\}, \qquad (6.10.41)$$

gde je $|\, m_s(\mathbf{r})\,\rangle$ svojstveni vektor od $\hat{s}_{\mathbf{r}}$ iz (6.10.40):

$$\hat{s}_{\mathbf{r}} \,|\, m_s(\mathbf{r})\,\rangle = m_s(\mathbf{r})\hbar \,|\, m_s(\mathbf{r})\,\rangle, \qquad (6.10.42)$$

a $\mathbf{r}_0$ je ort od $\mathbf{r}$ (iz prvog direktnog faktora $|\,\mathbf{r}\,\rangle$). Dakle, svaki $\mathbf{r}$ definiše odgovarajući bazis $\{|\, m_s(\mathbf{r})\,\rangle | \forall m_s(\mathbf{r})\}$ u $\mathcal{H}_s$, i za $\mathbf{r}$ sa različitim ortovima ovi bazisi su različiti.

Opisana reprezentacija naziva se *koordinatno* (ili radijus-vektorsko) *helicitetnom reprezentacijom*, a sam kvantni broj $m_s(\mathbf{r})$ naziva se *helicitetom*.

Zadatak 6.10.10 Pokazati da je sa (6.10.41) dat bazis, dakle kompletan ortonormiran skup vektora u $\mathcal{H}_u$.

Vektorska opservabla impulsa $\hat{\mathbf{p}}$ može da zameni $\hat{\mathbf{r}}$ i tako se dobija analogna reprezentacija koja se naziva *impulsno helicitetnom*. Koristi se u fizici elementarnih čestica.

Glava 7

Slaganje uglovnih momenata

7.1 Algebra i geometrija slaganja uglovnih momenata

U ovom odeljku ćemo izvesti jedan od najvažnijih rezultata kvantne teorije uglovnog momenta (a to je u stvari jedan od osnovnih zakona kvantne fizike); koje su moguće vrednosti kvantnih brojeva k za $\hat{\mathbf{K}}^2$, $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$, kada su date vrednosti kvantnih brojeva k_1 i k_2 od $\hat{\mathbf{K}}_1^2$ odnosno $\hat{\mathbf{K}}_2^2$. Proučićemo kako se dolazi do višestrukih ireducibilnih invarijantnih potprostora za $\hat{\mathbf{K}}$. Na kraju ćemo ukazati na uopštenja na proizvoljan broj sabiraka i dokazaćemo, za taj slučaj, teorem o celobrojnosti vrednosti kvantnog broja k opservable $\hat{\mathbf{K}}^2$, $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=1}^{N} \hat{\mathbf{K}}_n$.

7.1.1 Ukupni uglovni moment jedne čestice i otvorena pitanja

Videli smo da elektron, kao i veliki broj drugih elementarnih čestica, ima pored orbitnog i spinski uglovni moment. To dovodi do *ukupnog uglovnog momenta* $\hat{\mathbf{j}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$, definisanog u ukupnom prostoru stanja $\mathcal{H}_u \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$. Odmah sledi $[\, \hat{j}_x, \hat{j}_y \,] = \imath\hbar\hat{j}_z$ i ciklične permutacije. Znači i $\hat{\mathbf{j}}$ u $\mathcal{H}_u$ je jedna realizacija opšteg uglovnog momenta, te i za $\hat{\mathbf{j}}$ važe svi rezultati opšte teorije.

Znamo kako da razložimo i $\mathcal{H}_o$ i $\mathcal{H}_s$ do ireducibilnih potprostora za $\hat{\mathbf{l}}$ odnosno za $\hat{\mathbf{s}}$; znamo koje vrednosti od l se pojavljuju u $\mathcal{H}_o$ i koje za s u $\mathcal{H}_s$; najzad, znamo da konstruišemo standardni bazis posebno za $\hat{\mathbf{l}}$ u $\mathcal{H}_o$ i posebno za $\hat{\mathbf{s}}$ u $\mathcal{H}_s$. Postavlja se pitanje možemo li na osnovu svega toga znanja da odgovorimo na analogna pitanja u pogledu $\hat{\mathbf{j}}$ u $\mathcal{H}_u$: koje se vrednosti kvantnog broja j pojavljuju, kako da konstruišemo ireducibilne potprostore i standardni bazis za $\hat{\mathbf{j}}$.

Odgovore na ova pitanja izvešćemo (u ovom i sledećem odeljku) na jeziku opšte teorije kako bi rezultati bili primenljivi na slaganje dva proizvoljna uglovna momenta.

7.1.2 Slaganje i invarijantni potprostori

Neka su $\mathcal{H}_1$ i $\mathcal{H}_2$ dva Hilbert-ova prostora i neka su u njima definisani vektorski operatori uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}_1$ odnosno $\hat{\mathbf{K}}_2$.

Pod *slaganjem*, sprezanjem ili sabiranjem (engleski: *coupling* — čitati: kapling — ili *addition* -čitati: edišn) uglovnih momenata $\hat{\mathbf{K}}_1$ i $\hat{\mathbf{K}}_2$ podrazumeva se definisanje kompozitnog uglovnog

momenta

$$\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\rm def}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2, \tag{7.1.1a}$$

koji deluje u kompozitnom prostoru[7.1.1]

$$\mathcal{H}_{12} \stackrel{\rm def}{=} \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2. \tag{7.1.1b}$$

(Obratiti pažnju da u (7.1.1) $\hat{\mathbf{K}}_1$ treba razumeti kao $\hat{\mathbf{K}}_1 \otimes \hat{I}_2$, a $\hat{\mathbf{K}}_2$ kao $I_1 \otimes \hat{\mathbf{K}}_2$.)

Komutacione relacije uglovnog momenta, koje važe posebno za $\hat{\mathbf{K}}_1$ i $\hat{\mathbf{K}}_2$, imaju kao neposrednu posledicu analogne relacije za $\hat{\mathbf{K}}$:

$$[\,\hat{K}_x, \hat{K}_y\,] = \imath\hbar\hat{K}_z \text{ i cikl. perm.} \tag{7.1.2}$$

Prema tome, imamo sad tri uglovna momenta $\hat{\mathbf{K}}_1$, $\hat{\mathbf{K}}_2$ i $\hat{\mathbf{K}}$ i imamo u svakom od tri pomenuta prostora stanja razlaganje na ireducibilne potprostore:

$$\mathcal{H}_1 = \oplus_{k_1}\mathcal{V}_1^{(k_1)} = \oplus_{k_1} \oplus_{\lambda_1=1}^{d_{k_1}} \mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)}, \tag{7.1.3a}$$

$$\mathcal{H}_2 = \oplus_{k_2}\mathcal{V}_2^{(k_2)} = \oplus_{k_2} \oplus_{\lambda_2=1}^{d_{k_2}} \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}, \tag{7.1.3b}$$

$$\mathcal{H}_{12} = \oplus_{k}\mathcal{V}_{12}^{(k)} = \oplus_{k} \oplus_{\lambda=1}^{d_{k}} \mathcal{V}_{12}^{(k\lambda)}, \tag{7.1.3c}$$

(uporediti (6.3.1) i (6.3.7)).

Pretpostavljamo da su svi detalji razlaganja (7.1.3a) i (7.1.3b) poznati, tj. u analogiji sa $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$, pretpostavljamo da su $\hat{\mathbf{K}}_1$ i $\hat{\mathbf{K}}_2$ prethodno detaljno proučeni. O (7.1.3c) znamo samo da k-ovi ne mogu biti drugo do celi ili poluceli nenegativni brojevi i da je $\dim \mathcal{V}_{12}^{(k\lambda)} = 2k+1$, $\forall\lambda$ (videti (6.2.30) i (6.3.7)). Ostale detalje u (7.1.3c) ćemo sada izvesti iz (7.1.3a) i (7.1.3b).

Možemo zameniti (7.1.3a, 7.1.3b) u (7.1.1b) i dobiti

$$\mathcal{H}_{12} = \oplus_{k_1,k_2}(\mathcal{V}_1^{(k_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2)}) = \oplus_{k_1,k_2} \oplus_{\lambda_1,\lambda_2} (\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}). \tag{7.1.4}$$

Pitamo se da li su ove dekompozicije od $\mathcal{H}_{12}$ invarijantne za $\hat{\mathbf{K}}$.

Lema 7.1.1 *Ako je $\mathcal{V}_1 \subseteq \mathcal{H}_1$ invarijantan potprostor za $\hat{\mathbf{K}}_1$, a $\mathcal{V}_2 \subseteq \mathcal{H}_2$ invarijantan potprostor za $\hat{\mathbf{K}}_2$ onda je $\mathcal{V}_1 \otimes \mathcal{V}_2 \subseteq \mathcal{H}_{12}$ invarijantan potprostor za $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\rm def}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$ u $\mathcal{H}_{12} \stackrel{\rm def}{=} \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.*

Dokaz: Dokaz je očigledan kada se sa (7.1.1a) deluje na nekorelisane vektore koji obrazuju $\mathcal{V}_1 \otimes \mathcal{V}_2$. *Q. E. D.*

Znači, (7.1.4) predstavlja invarijantnu dekompoziciju kompozitnog prostora $\mathcal{H}_{12}$ za $\hat{\mathbf{K}}$. Preostaje nam samo da potprostore $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$ dekomponujemo do ireducibilnih potprostora za $\hat{\mathbf{K}}$, tj. da izvršimo razlaganje (7.1.3c) pomenutih potprostora (umesto celog prostora $\mathcal{H}_{12}$).

[7.1.1] Sabiranje uglovnih momenata je nužno propraćeno kompozicijom podsistema u nadsistem (7.1.1b). Fizički smisao ove činjenice je u tome što samo podsistemi (materijalni podsistemi ili kinematički stepeni slobode, uporediti § 6.9.6) mogu imati uglovni moment sa punim fizičkim smislom tog pojma.

7.1.3 Dimenzije potprostora

U potprostoru $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$, sa fiksiranim k_1, λ_1, k_2, λ_2, imamo bazis

$$\{|\, k_1\, m_1\, \lambda_1 \,\rangle \,|\, k_2\, m_2\, \lambda_2 \,\rangle \mid m_1 = -k_1, \ldots, k_1;\; m_2 = -k_2, \ldots, k_2\}. \tag{7.1.5}$$

Pođimo od zapažanja da je ovo svojstveni bazis opservable $\hat{K}_z \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_1^{(z)} + \hat{K}_2^{(z)}$, tj. da važi

$$\hat{K}_z \,|\, k_1\, m_1\, \lambda_1 \,\rangle \,|\, k_2\, m_2\, \lambda_2 \,\rangle = (m_1 + m_2)\hbar \,|\, k_1\, m_1\, \lambda_1 \,\rangle \,|\, k_2\, m_2\, \lambda_2 \,\rangle, \quad \forall m_1, m_2 \tag{7.1.6}$$

i da pomoću bazisa (7.1.5) lako možemo da zaključimo kolika je dimenzija pojedinih svojstvenih potprostora $\mathcal{V}_m$ od $\hat{K}_z$ unutar $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$. Nameće se ideja da iz ovih $\dim \mathcal{V}_m$ pokušamo da zaključimo koliki su d_k. Ali prvo izvucimo jedan neposredan zaključak iz (7.1.5) i (7.1.6).

Lema 7.1.2 *Sve vrednosti magnetnog kvantnog broja $m = m_1 + m_2$ za kompozitni $\hat{K}_z \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_1^{(z)} + \hat{K}_2^{(z)}$ koje se pojavljuju u $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$ su jedne te iste celobrojnosti (za termin uporediti kraj od § 6.2.9). Drugim rečima, ili su sve vrednosti od m celi brojevi, a to je slučaj ako su m_1 i m_2 (zapravo k_1 i k_2) jednake celobrojnosti (i jedni i drugi celi ili i jedni i drugi poluceli); ili su svi m poluceli, ako su k_1 i k_2 različite celobrojnosti.*

Dokaz: Iskaz je očigledan *Q. E. D.* .

Pošto se celobrojnost od m uvek podudara sa celobrojnošću od k, iz Leme L 7.1.2 odmah sledi

Lema 7.1.3 *Sve vrednosti kvantnog broja k ukupnog uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$ koje se pojavljuju u $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$ su jedne te iste celobrojnosti i ona se podudara sa celobrojnošću broja $k_1 + k_2$.*

Vratimo se sad za trenutak čak na opšti slučaj jednog uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}$ u $\mathcal{H}$ (ne nužno uz važenje (7.1.1)). Pretpostavimo da se pojavljuju samo polucele vrednosti za k (da se pojavljuju samo cele vrednosti bilo bi analogno). Poređajmo svojstvene potprostore $\mathcal{V}_k$ od $\hat{\mathbf{K}}^2$ u $\mathcal{H}$ po rastućem k (jedan primer je prikazan na Crtežu C 7.1). Vidimo da važi

$$\dim \mathcal{V}_m = \sum_{k \geq |m|} d_k \tag{7.1.7}$$

($\dim \mathcal{V}_m$ je broj kvadratića u odgovarajućoj vrsti Crteža).

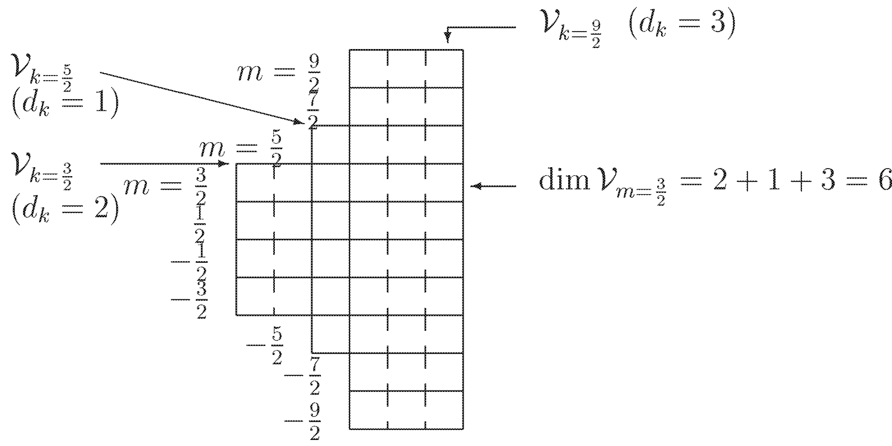
Ako fiksiramo bilo koje k i pišemo ga kao k_0 (7.1.7) implicira:

$$\dim \mathcal{V}_{m=k_0} = d_{k_0} + \sum_{k \geq (k_0+1)} d_k, \quad \dim \mathcal{V}_{m=k_0+1} = \sum_{k \geq (k_0+1)} d_k. \tag{7.1.8}$$

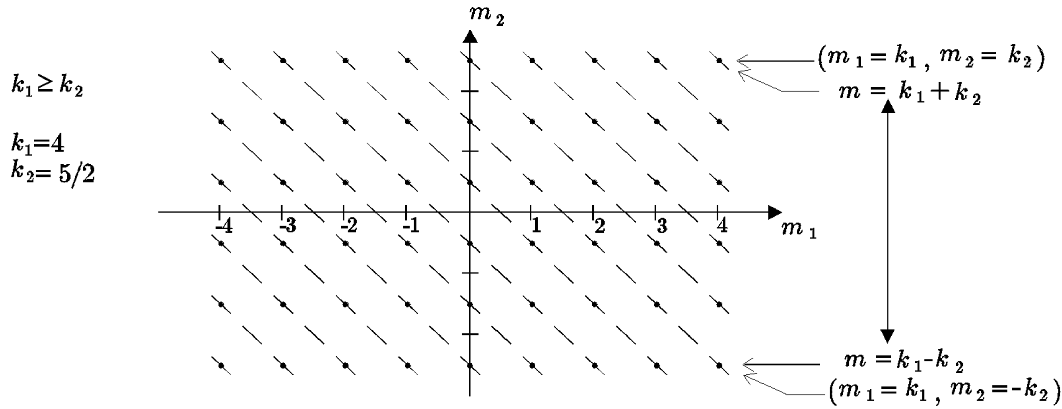
Ove jednakosti, sa svoje strane, daju

$$\boxed{d_{k_0} = \dim \mathcal{V}_{m=k_0} - \dim \mathcal{V}_{m=k_0+1}}, \quad \forall k_0. \tag{7.1.9}$$

Na Crtežu C 7.1 se lako može videti da važi (7.1.9), i to na primeru $k_0 = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$ i $\frac{9}{2}$.



Slika 7.1: Dimenzije svojstvenih potprostora $\mathcal{V}_m$ operatora $\hat{K}_3$.



Slika 7.2: Vrednosti kvantnog broja m za vektore $|\, k_1\, m_1\, \lambda_1 \,\rangle \,|\, k_2\, m_2\, \lambda_2 \,\rangle$.

7.1.4 Vrednosti kvantnog broja od $(\hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2)^2$

Videli smo da iz (7.1.9) možemo dobiti d_k ako prethodno izračunamo $\dim \mathcal{V}_m$ za $m \geq 0$. A za to će nam poslužiti bazis (7.1.5) uz pomoć Crteža C 7.2.

Na Crtežu C 7.2 smo pretpostavili $k_1 \geq k_2$. Tačke predstavljaju vektore $|\ k_1\, m_1\, \lambda_1\ \rangle\ |\ k_2\, m_2\, \lambda_2 \rangle$, u bazisu (7.1.5) (preko apscise m_1 i ordinate m_2). Kose isprekidane linije predstavljaju pojedine vrednosti od $m = m_1 + m_2$, te je *broj tačaka* na takvoj liniji jednak $\dim \mathcal{V}_m$.

Sa Crteža C 7.2 je jasno da je $m \geq 0$ i $\dim \mathcal{V}_m \neq \dim \mathcal{V}_{m+1}$ imamo samo u intervalu kosih linija koji je naznačen dvosmernom strelicom, i tu je stalno $\dim \mathcal{V}_m = \dim \mathcal{V}_{m+1} + 1$. Na prvoj i poslednjoj liniji tog intervala vrednost od m je $k_1 + k_2$ odnosno $k_1 - k_2$, kao što se može zaključiti po tačkama na koje ukazuju strelice.

Prema tome, iz (7.1.9) sledi: $d_k = 1$, za $k = |k_1 - k_2|, |k_1 - k_2| + 1, \ldots, k_1 + k_2$; $d_k = 0$ inače. (Da smo imali $k_2 \geq k_1$, stavili bismo m_2 na apscisu i dobili bismo na donjoj granici $k_2 - k_1$. Obe mogućnosti obuhvatamo sa $|k_1 - k_2|$.)

Dokazali smo sledeći teorem:

Teorem 7.1.1 *Direktan proizvod ireducibilnih potprostora (za $\hat{\mathbf{K}}_1$, odnosno $\hat{\mathbf{K}}_2$) $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$*

dekomponuje se svojstvenim razlaganjem opservable $\hat{\mathbf{K}}^2$ *u po jedan ireducibilni potprostor* $\mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)} \subseteq \mathcal{H}_{12}$ *za sledeće vrednosti od* k*:*

$$\boxed{k = |k_1 - k_2|,\ |k_1 - k_2| + 1,\ \ldots, k_1 + k_2;} \tag{7.1.10}$$

tj.

$$\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)} = \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}. \tag{7.1.11a}$$

Zadatak 7.1.1 Za konkretni slučaj sa Crteža C 7.2 nacrtati pojedine $\mathcal{V}_m$ (sa $\dim \mathcal{V}_m \neq 0$) i to u vidu položene piramide kao na Crtežu C 7.1.

Zadatak 7.1.2 Proveriti razlaganje (7.1.11a) po dimenzijama potprostora sabiraka, tj. pokazati da uvek važi

$$\dim(\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}) = \sum_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \dim \mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}. \tag{7.1.11b}$$

7.1.5 Višestruki ireducibilni invarijantni potprostori za $\hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$

Ako zamenimo (7.1.11a) u (7.1.4) i ako se koristimo činjenicom da ni izvođenje ni rezultat Teorema T 7.1.1 ne zavise od konkretnih vrednosti λ_1 i λ_2, tako da možemo da uzajamno zamenimo redosled sumiranja po λ_1, λ_2 i po k, onda dolazimo do

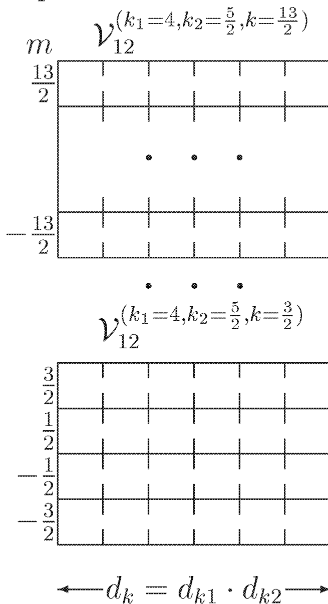
$$\mathcal{H}_{12} = \oplus_{k_1k_2} \oplus_{\lambda_1\lambda_2} \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)} = \oplus_{k_1k_2} \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \mathcal{V}_{12}^{(k_1k_2k)}, \tag{7.1.12}$$

gde je

$$\mathcal{V}_{12}^{(k_1k_2k)} \stackrel{\text{def}}{=} \oplus_{\lambda_1=1}^{d_{k_1}} \oplus_{\lambda_2=1}^{d_{k_2}} \mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}. \tag{7.1.13}$$

a $\mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}$ su ireducibilni invarijantni potprostori za $\hat{\mathbf{K}}$ u $\mathcal{H}_{12}$.

Invarijantni potprostor $\oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \oplus_{\lambda_1,\lambda_2} \mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}$ prikazan je dijagramatski na Crtežu C 7.3 za isti primer kao na Crtežu C 7.2: $k_1 = 4,\ k_2 = \frac{5}{2}$.



Slika 7.3: **Višestruki ireducibilni invarijantni potprostori za $\hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$, $\lambda \stackrel{\text{def}}{=} (\lambda_1, \lambda_2)$**

Sad se moramo zapitati da li smo sa (7.1.12) i (7.1.13) postigli naš prvobitni cilj (7.1.3c), tj. da li su pravougaonici $\mathcal{V}_{12}^{(k_1k_2k)}$ na Crtežu C 7.3 višestruki ireducibilni potprostori za $\hat{\mathbf{K}}$ u $\mathcal{H}_{12}$ koje smo obeležili sa $\mathcal{V}_{12}^{(k)}$ u (7.1.3c). Očigledno je da bi odgovor bio potvrdan ako bi različiti parovi k_1, k_2 davali nužno različite k (bez prepoklapanja intervala (7.1.10)). To, naravno, nije slučaj. Drugim rečima, u pravougaonicima na Crtežu C 7.3 nisu nužno obuhvaćeni svi ireducibilni potprostori (kolone) koji odgovaraju pojedinim vrednostima od k u $\mathcal{H}_{12}$ (jer su k_1 i k_2 fiksirani).

Lako se vidi da konačni rezultat naših razmatranja u ovom odeljku treba da glasi:

Teorem 7.1.2 *Dok se ireducibilni potprostori* $\mathcal{V}_{12}^{(k\lambda)}$ *za* $\hat{\mathbf{K}}$ *u* $\mathcal{H}_{12}$ *(videti (7.1.3c)) mogu dobiti kao što je rečeno u Teoremu T 7.1.1:*

$$\mathcal{V}_{12}^{(k\lambda)} = \mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}, \quad \lambda \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_1,\ \lambda_2,\ \ \forall k \qquad (7.1.14a)$$

(videti (7.1.11a)), višestruki ireducibilni potprostori $\mathcal{V}_{12}^{(k)}$ *iz (7.1.3c) glase:*

$$\mathcal{V}_{12}^{(k)} = \oplus'_{k_1,k_2}\mathcal{V}_{12}^{(k_1k_2k)}, \quad |k_1 - k_2| \le k \le k_1 + k_2, \quad (7.1.14b,c)$$

gde apostrof na sumi u (7.1.14b) znači da se sumira po parovima k_1, k_2 *koji zadovoljavaju obe nejednakosti u (7.1.14c); a višestrukosti* d_k *mogu da se pišu u vidu:*

$$d_k = \sum\nolimits'_{k_1,k_2} d_{k_1}d_{k_2}, \qquad (7.1.14d)$$

(apostrof opet znači da je (7.1.14c) ograničenje na izbor parova $k_1,\ k_2$ *po kojima se sumira).*

***Napomena* 7.1.1** *Znamo iz opšte teorije jednog uglovnog momenta da razlaganje na ireducibilne invarijantne potprostore (7.1.3c) ima isti smisao za* $\hat{\mathbf{K}}$ *kao i za odgovarajuću rotacionu grupu* $\{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}}|\phi\mathbf{u}$ *iz* π*-lopte*$\}$ *u kompozitnom prostoru* $\mathcal{H}_{12}$*. Usled* $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$ *rotacije u* $\mathcal{H}_{12}$ *u stvari glase*

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}_1} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}_2} \qquad (7.1.15)$$

i znače isto rotiranje (tj. rotiranje za isti $\phi\mathbf{u}$*) u* $\mathcal{H}_1$ *i* $\mathcal{H}_2$*.*

7.1.6 Slaganje tri ili više uglovnih momenata

Kad imamo vezano stanje dve čestice sa spinom $s = \frac{1}{2}$ (kao deuteron ili kao neutralni atom vodonika), onda se ukupni uglovni moment sistema sastoji od zbira tri uglovna momenta

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2, \qquad (7.1.16)$$

gde je $\hat{\mathbf{l}}$ orbitni uglovni moment sistema (uporediti (4.5.12a). Postavlja se pitanje koje vrednosti može da poprimi kvantni broj J od $\hat{\mathbf{J}}^2$ kada imamo po jedan fiksiran kvantni broj l od $\hat{\mathbf{l}}^2$, s_1 od $\hat{\mathbf{s}}_1^2$ i s_2 od $\hat{\mathbf{s}}_2^2$.

Da bismo dobili odgovor na ovo pitanje, moramo prvo dva od naša tri uglovna momenta spregnuti (bilo koja dva), recimo, $\hat{\mathbf{l}}$ i $\hat{\mathbf{s}}_1$. Obeležavajući sa $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}_1$ dobićemo sledeće vrednosti kvantnog broja k od $\hat{\mathbf{K}}^2$: $k = |l - s_1|, |l - s_1| + 1, \ldots, l + s_1$. Svaku od ovih vrednosti onda sprežemo sa s_2 na isti način. Tako ćemo dobiti sve vrednosti koje J može da ima

$$J = ||l-s_1|-s_2|, \ldots, |l-s_1|+s_2; ||l-s_1|+1-s_2|, \ldots, |l-s_1|+1+s_2; \ldots, |l+s_1-s_2|, \ldots, l+s_1+s_2. \qquad (7.1.17)$$

Ovaj *postupak sukcesivnog slaganja dva po dva uglovna momenta* se neposredno proširuje na slučaj više od tri sabirka.

Čitalac se možda zapitao zašto je redosled u sukcesivnom slaganju po dva uglovna momenta irelevantan. Neka je $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=1}^{N} \hat{\mathbf{K}}_n$ i neka je $p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ p_1 & p_2 & \dots & p_N \end{pmatrix}$ proizvoljna permutacija reda N. Kao što je poznato, možemo permutovati sabirke bez promene zbira: $\sum_{n=1}^{N} \hat{\mathbf{K}}_{p_n} = \sum_{n=1}^{N} \hat{\mathbf{K}}_n = \hat{\mathbf{K}}$. Pretpostavimo da smo izračunali, pomenutim metodom sukcesivnog sprezanja, spektar i multiplicitete od $\hat{\mathbf{K}}^2$ pre i posle permutacije. Kad ne bismo dobili isto na oba ova načina (sabiranja uglovnih momenata) protivurečili bismo ili mogućnosti permutovanja sabiraka ili asocijativnosti sabiranja ili samoj teoriji slaganja dva uglovna momenta. Naravno, ni jedno ni drugo ne dolazi u obzir.

Dokazaćemo sledeći teorem.

Teorem 7.1.3 *Pretpostavimo da slažemo N uglovnih momenata $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=1}^{N} \hat{\mathbf{K}}_n$, $N \geq 2$, i da su vrednosti kvantnih brojeva $k_1, k_2, \dots, k_N$ (od $\hat{\mathbf{K}}_1^2, \hat{\mathbf{K}}_2^2, \dots, \hat{\mathbf{K}}_N^2$) fiksirane. Sve vrednosti kvantnog broja k od $\hat{\mathbf{K}}^2$ su onda jedne te iste celobrojnosti i to: one su celi brojevi ako među $k_1, \dots, k_N$ imamo paran broj polucelih, a vrednosti od k su polucele ako i samo ako među pomenutim kvantnim brojevima ima neparan broj polucelih.*

Dokaz: Iz Leme 3 odmah sledi da Teorem T 7.1.3 važi za $N = 2$. Pokazaćemo da ako važi za N_0, važi i za $N_0 + 1$ (metod totalne indukcije) i to pomoću sledeće šeme na kojoj samo treba proslediti sve četiri mogućnosti. Neka je

$$\sum_{n=1}^{N_0} \hat{\mathbf{K}}_n = \hat{\mathbf{K}}' \quad \hat{\mathbf{K}}' + \hat{\mathbf{K}}_{N_0+1} = \hat{\mathbf{K}}.$$

Ako je broj polucelih od $k_1, \dots\dots, k_{N_0}$ paran, onda i samo onda je k' ceo, a ako je neparan onda i samo onda je k' poluceo. Tada je $k \begin{cases} \text{ceo} & \Leftrightarrow \begin{cases} k' \text{ ceo} & \text{i } k_{N_0+1} \text{ ceo, ili} \\ k' \text{ poluceo} & \text{i } k_{N_0+1} \text{ poluceo,} \end{cases} \\ \text{poluceo} & \Leftrightarrow \begin{cases} k' \text{ ceo} & \text{i } k_{N_0+1} \text{ poluceo, ili} \\ k' \text{ poluceo} & \text{i } k_{N_0+1} \text{ ceo,} \end{cases} \end{cases}$ (pretpostavljamo da znamo k). *Q. E. D.*

7.2 Standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}}$, Clebsch-Gordan-ovi i $6j$ koeficijenti

U ovom odeljku ćemo se suočiti sa problemom da direktni proizvod standardnih bazisa za $\hat{\mathbf{K}}_1$ odnosno za $\hat{\mathbf{K}}_2$ nije standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}}$. Na osnovu opšte teorije, sa izvesnom dodatnom specifikacijom, konstruisaćemo standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}}$ u kompozitnom prostoru. Proučićemo matricu razvoja ovog bazisa po pomenutom direktnom proizvodu bazisa. Matrični elementi matrice razvoja su tzv. Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti. Ukazaćemo na potpune skupove kompatibilnih opservabli koji definišu pomenute respektivne bazise kao svoj zajednički svojstveni bazis. Osvrnućemo se na ulogu rotacija u kompozitnom prostoru. Na kraju, objasnićemo pojam $6j$-, $9j$- itd. koeficijenata, koji se pojavljuju pri sabiranju 3, 4, itd. uglovna momenta.

7.2.1 Prelazak na standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$

U prethodnom odeljku smo razložili proizvod ireducibilnih potprostora $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$ u niz $\mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}$, $k = |k_1 - k_2|, |k_1 - k_2| + 1, \dots, k_1 + k_2$ neekvivalentnih (u pogledu $\hat{\mathbf{K}}$) ireducibilnih

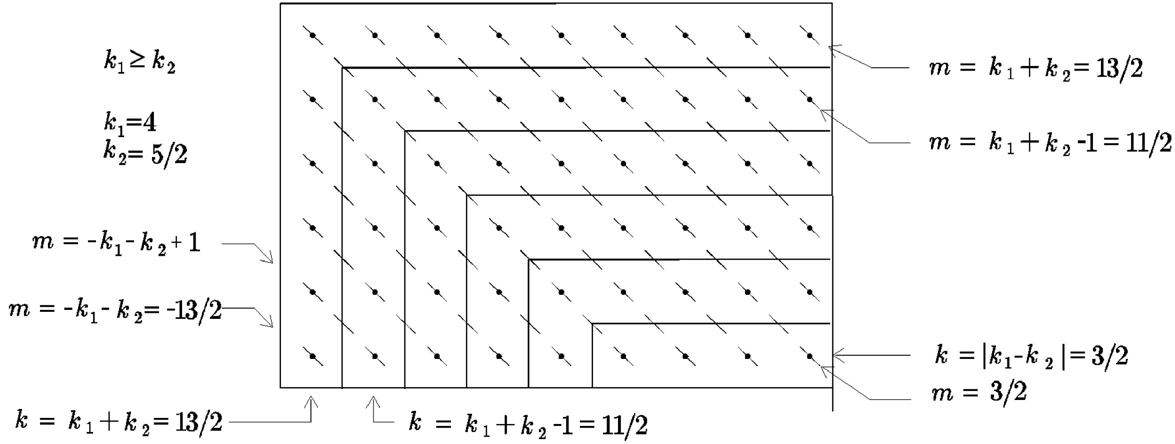
invarijantnih potprostora za $\hat{\mathbf{K}}$. Od standardnih bazisa u $\mathcal{H}_1$ i $\mathcal{H}_2$ nasledili smo u $\mathcal{H}_{12}$ indukovani bazis

$$\{|\, k_1 m_1 \lambda_1 \rangle \,|\, k_2 m_2 \lambda_2 \rangle \mid m_1 = -k_1, \ldots, k_1,\ m_2 = -k_2, \ldots, k_2\}, \tag{7.2.1}$$

koji, doduše, obrazuje pomenuti potprostor $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$, ali nije adaptiran na njegovu dekompoziciju $\sum_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}$ i nije standardan za $\hat{\mathbf{K}}$. Standardan bazis za $\hat{\mathbf{K}}$ bismo pisali u vidu:

$$\{|\, k_1 k_2 \lambda_1 \lambda_2; k\, m \rangle | m = -k, \ldots, k,\ k = |k_1 - k_2|, \ldots, k_1 + k_2\}. \tag{7.2.2}$$

Bazis (7.2.1) je dijagramatski prikazan skupom tačkica raspoređenih po površini pravougaonika na C 7.2. I bazis (7.2.2) se može prikazati na analogan način[7.2.1] i učinićemo to na Crtežu C 7.4.



Slika 7.4: Standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$.

Upoređujući Crtež C 7.4 sa C 7.2, možemo konstatovati da su to sad druge tačkice, ali opet predstavljaju po jedan vektor iz svojstvenih potprostora $\mathcal{V}_m$ za $\hat{K}_z \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_1^{(z)} + \hat{K}_2^{(z)}$ (vektori iz (7.2.2) ne iz (7.2.1)); da umesto m_1 i m_2 imamo nove koordinate: m i k (k prebrojava oivičene delove pravougaonika, koji predstavljaju svojstvene potprostore $\mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}$). Ovo poređenje je instruktivno jer oba pomenuta crteža prikazuju eksplicitno ono što je zajedničko u (7.2.1) i (7.2.2): relevantnost svojstvenih potprostora $\mathcal{V}_m$ od $\hat{K}_z$ (kose isprekidane linije).

Mi sad želimo da bazis (7.2.2) razvijemo po bazisu (7.2.1) pomoću jednoznačno definisane matrice razvoja.

7.2.2 Jednoznačnost matrice razvoja

Ako se podsetimo definicije standardnog bazisa (6.3.6), uočićemo da u bazisu (7.2.1) imamo samo jedan slobodan fazni faktor: recimo, ako u $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)}$ standardni bazis pomnožimo zajedničkim faznim faktorom $e^{\imath\phi}$, a u $\mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$ analogno sa $e^{\imath\psi}$, onda bazis (7.2.1) množimo zajedničkim faznim faktorom $e^{\imath(\phi+\psi)}$. U bazisu (7.2.2), međutim, otvorenih faznih faktora ima toliko koliko ima različitih vrednosti k. Tako ne možemo dobiti jednoznačnu matricu razvoja.

[7.2.1] Autor je zahvalan magistrantu Milanu Džambazovskom što je dao ideju za Crtež C 7.4.

U stvari moramo da suzimo pojam standardnog bazisa u primeni na (7.2.2), tj. moramo ga preciznije definisati, tako da (7.2.2) nema ni jedan slobodan fazni faktor u odnosu na (7.2.1). Drugim rečima, bazis (7.2.2) mora biti jednoznačna funkcija bazisa (7.2.1).

Pomenuto suženje se postiže sledećom *konvencijom*. U svakom $\mathcal{V}_{12}^{(k\lambda_1\lambda_2)}$ slobodni fazni faktor vektora $|\ k_1k_2\lambda_1\lambda_2; k, m=k\ \rangle$ biramo tako (a to je očigledno jednoznačno) da ima pozitivnu projekciju na $|\ k_1, m_1=k_1, \lambda\ \rangle\ |\ k_2, m_2=k-k_1, \lambda_2\ \rangle$:

$$\langle k_1, m_1=k_1, \lambda_1\ |\ \langle\ k_2, m_2=k-k_1, \lambda_2\ |\ k_1k_2\lambda_1\lambda_2; k, m=k\rangle > 0, \quad \forall k_1, k_2, \lambda_1, \lambda_2, k. \qquad (7.2.3)$$

Konvencija (7.2.3), naravno, ima za premisu da dotični skalarni proizvod ne može biti nula. A da je ovo stvarno slučaj pokazuje se u detaljnijim priručnicima kvantne teorije uglovnog momenta[7.2.2].

Ako se zapitamo da li nakon konvencije (7.2.3) bazis (7.2.2) zavisi od eventualnog množenja bazisa (7.2.1) faznim faktorom $e^{\imath(\phi+\psi)}$, dolazimo do zaključka da sam bazis (7.2.2) zavisi, ali matrica razvoja bazisa (7.2.2) po bazisu (7.2.1) ne zavisi od pomenutog množenja, jer da bi se održalo važenje konvencije (7.2.3) moramo i sve vektore bazisa (7.2.2) pomnožiti istim faktorom $e^{\imath(\phi+\psi)}$.

Preostaje još veoma važno pitanje da li matrica razvoja zavisi od vrednosti dodatnih kvantnih brojeva λ_1 i λ_2.

Teorem 7.2.1 *Matrica razvoja bazisa (7.2.2) po bazisu (7.2.1) uz važenje (7.2.3) je jedna te ista u svim potprostorima* $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$, $\lambda_1 = 1, \ldots, d_{k_1}$, $\lambda_2 = 1, \ldots, d_{k_2}$, *tj. ona je jedinstvena.*

Dokaz ćemo dati u Dodatku § 7.2.8.

7.2.3 Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti i selekciona pravila

Matrični elementi matrice razvoja bazisa (7.2.2) po bazisu (7.2.1) uz važenje (7.2.3) nazivaju se *Clebsch-Gordan*-ovim (čitati: Klebš-Gordanovim) ili skraćeno *CG-koeficijentima* (engleski još i: *vector-coupling coefficients*). Možemo pisati

$$\boxed{|\ k_1k_2\lambda_1\lambda_2; km\ \rangle = \sum_{m_1=-k_1}^{k_1} |\ k_1m_1\lambda_1\ \rangle\ |\ k_2, m_2=m-m_1, \lambda_2\ \rangle\langle\ k_1k_2m_1, m_2=m-m_1\ |\ km\rangle},$$

$$m=-k, \ldots, k, \quad k=|k_1-k_2|, \ldots, k_1+k_2, \qquad (7.2.4a)$$

ili inverzni razvoj bazisa (7.2.1) po bazisu (7.2.2):

$$|\ k_1m_1\lambda_1\ \rangle\ |\ k_2m_2\lambda_2\ \rangle = \sum_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} |\ k_1k_2\lambda_1\lambda_2; k, m=m_1+m_2\ \rangle\langle\ k_1k_2k, m=m_1+m_2\ |\ m_1m_2\rangle. \qquad (7.2.4b)$$

[7.2.2]Konvencija (7.2.3) je ekvivalentna tzv. konvenciji Condon-a i Shortley-ja (čitati: Kondon i Šortli); po potrebi videti njihovu znamenitu monografiju: B.U. Condon, G.H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge, 1935. Jedan od najpoznatijih pomenutih priručnika je: A.R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton, Princeton University Press, 1957.

U formule (7.2.4) smo već ugradili tzv. *selekciona pravila*:

$$\boxed{m = m_1 + m_2, \quad |k_1 - k_2| \leq k \leq k_1 + k_2}, \tag{7.2.5a,b}$$

kako se obično naziva činjenica da samo kvantnim brojevima koji zadovoljavaju relacije (7.2.5) odgovaraju nenulti CG-koeficijenti. To je očigledna posledica činjenice da su i bazis (7.2.1) i bazis (7.2.2) svojstveni bazisi opservable $\hat{K}_z$ i osnovnog rezultata prethodnog odeljka (T 7.1.1).

Selekciono pravilo (7.2.5b) se naziva *pravilom trougla*, jer izražava upravo činjenicu da veličine k_1, k_2 i k moraju biti takve da mogu biti stranice trougla. Stoga je i očigledno da se (7.2.5b) može ekvivalentno prepisati u bilo kom od sledeća dva vida

$$|k_1 - k| \leq k_2 \leq k_1 + k; \quad |k_2 - k| \leq k_1 \leq k_2 + k. \tag{7.2.5c,d}$$

Zadatak 7.2.1 Izvesti (7.2.4a) i (7.2.4b) pomoću relacija zatvorenosti bazisa (7.2.1) odnosno (7.2.2) u $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)} \subseteq \mathcal{H}_{12}$.

Ispostavlja se da su svi CG-koeficijenti *realni* brojevi[7.2.3]. Stoga koeficijenti $\langle\, k_1k_2km \mid m_1m_2\rangle$ i $\langle\, k_1k_2m_1m_2 \mid km\rangle$ sa istim kvantnim brojevima, koji se pojavljuju u (7.2.4b) odnosno (7.2.4a), su u stvari jednaki (bili bi uzajamno kompleksno-konjugovani, jer se u njima uzajamno zamenila uloga bra i ket vektora). Odsad ćemo umesto koeficijenata $\langle\, k_1k_2km \mid m_1m_2\rangle$ uvek pisati $\langle\, k_1k_2m_1m_2 \mid km\rangle$.

Dotične koeficijente možemo posmatrati kao matrične elemente matrica razvijanja M i N u smislu (pojednostavljeno napisanih) jednakosti (7.2.4):

$$|\, km\,\rangle = \sum_{m_1m_2} M_{km,m_1m_2} \mid m_1\,\rangle \mid m_2\,\rangle, \ \mid m_1\,\rangle \mid m_2\,\rangle = \sum_k N_{m_1m_2,km} \mid km\,\rangle; \tag{7.2.6a,b}$$

$$M_{km,m_1m_2} = \langle\, k_1k_2m_1m_2 \mid km\rangle, \tag{7.2.7a}$$

$$N_{m_1m_2,km} = \langle\, k_1k_2m_1m_2 \mid km\rangle = M_{km,m_1m_2}. \tag{7.2.7b}$$

U opštem slučaju imali bismo $N = M^{-1} = M^\dagger = (M^T)^*$ (zbog unitarnosti), ali zbog realnosti matrice M imamo $N = M^T$. To se vidi i iz jednakosti (7.2.7b).

Pošto je matrica M (kao i N) unitarna (jer prevodi ortonormirani bazis u isti takav), njeni matrični elementi, tj. CG-koeficijenti, zadovoljavaju *uslove ortonormiranosti vrsta i kolona*:

$$\sum_{m_1m_2} \langle\, k_1k_2m_1m_2 \mid km\rangle\langle\, k_1k_2m_1m_2 \mid k'm'\rangle = \delta_{kk'}\delta_{mm'}, \tag{7.2.8a}$$

$$\sum_{km}\langle\, k_1k_2m_1m_2 \mid km\rangle\langle\, k_1k_2m_1'm_2' \mid km\rangle = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}. \tag{7.2.8b}$$

Na kraju ovog paragrafa, daćemo bez dokaza *jednu opštu formulu za izračunavanje CG-koeficijenata.*

$$\langle\, k_1k_2m_1m_2 \mid km\rangle = \delta_{m_1+m_2,m}\sqrt{\frac{(2k+1)(k_1+k_2-k)!(k_1-k_2+k)!(k_2-k_1+k)!}{(k_1+k_2+k+1)!}}\times \tag{7.2.9}$$

$$\sum_z (-1)^z \frac{\sqrt{(k_1+m_1)!(k_1-m_1)!(k_2+m_2)!(k_2-m_2)!(k+m)!(k-m)!}}{z!(k_1+k_2-k-z)!(k_1-m_1-z)!(k_2+m_2-z)!(k-k_2+m_1+z)!(k-k_1-m_2+z)!}$$

(gde z uzima sve vrednosti za koje su svi izrazi u kojima se z pojavljuje definisani).

[7.2.3] Dokaz je dat u § 8.2.8

7.2.4 Wigner-ovi $3j$-koeficijenti

Radi postizanja lepših osobina, Wigner je uveo tzv. $3j$-koeficijente po definiciji (mi pišemo k umesto j):

$$\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} (-1)^{k_1-k_2-m_3}(2k_3+1)^{-\frac{1}{2}}\langle\, k_1k_2m_1m_2 \mid k_3m_3\rangle, \tag{7.2.10}$$

pri čemu k_1, k_2 i k_3 mogu biti bilo koji kvantni brojevi uglovnog momenta, tj. l, s, j, L, S, J itd. Bitno je da se dva od njih sprežu u treći (iz osobina niže se vidi da nije važno koja dva se sprežu).

Naravno, i $3j$-koeficijenti zadovoljavaju selekciona pravila (7.2.5a, 7.2.5b). Osim toga, ovi koeficijenti imaju sledeće osobine *simetrije*:

1. koeficijenti ne menjaju svoju vrednost pri cikličnoj permutaciji tri kolone;
2. koeficijenti se množe sa $(-1)^{k_1+k_2+k_3}$ pri anticikličnoj permutaciji pomenute tri kolone;
3. koeficijenti se množe sa $(-1)^{k_1+k_2+k_3}$ ako se promeni predznak od m_1, m_2 i m_3 istovremeno.

7.2.5 Potpuni skupovi kompatibilnih opservabli

Vratimo se bazisima (7.2.1) i (7.2.2) i podsetimo se koji potpuni skupovi kompatibilnih opservabli u $\mathcal{H}_{12}$ definišu te bazise kao svoje zajedničke svojstvene bazise.

U slučaju bazisa (7.2.1) to su

$$\hat{\mathbf{K}}_1^2,\ \hat{K}_1^{(z)},\ \hat{A}_1;\ \hat{\mathbf{K}}_2^2,\ \hat{K}_2^{(z)},\ \hat{A}_2; \tag{7.2.11a}$$

a u slučaju bazisa (7.2.2) radi se o

$$\hat{\mathbf{K}}_1^2,\ \hat{\mathbf{K}}_2^2,\ \hat{A}_1,\ \hat{A}_2;\ \hat{\mathbf{K}}^2,\ \hat{K}_z. \tag{7.2.11b}$$

Opservable A_1 i A_2 su dodatne u odnosu na uglovne momente (mogu biti i skupovi dodatnih opservabli); njihovi su kvantni brojevi λ_1 odnosno λ_2.

Važno je uočiti da skupovi (7.2.11a) i (7.2.11b) imaju *zajednički podskup* opservabli

$$\hat{\mathbf{K}}_1^2,\ \hat{A}_1,\ \hat{\mathbf{K}}_2^2,\ \hat{A}_2, \tag{7.2.11c}$$

čiji je zajednički svojstveni potprostor $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$, potprostor koji je, kao što smo videli, pozornica svih zbivanja u sprezanju uglovnih momenata.

Još je važnije imati na umu da se pri sprezanju vrši zamena

$$\boxed{\{\hat{K}_1^{(z)},\ \hat{K}_2^{(z)}\} \ \to\ \{\hat{\mathbf{K}}^2 \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{\mathbf{K}}_1+\hat{\mathbf{K}}_2)^2,\ \hat{K}_z \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_1^{(z)}+\hat{K}_2^{(z)}}\}, \tag{7.2.11d}$$

tj. dok se skup (7.2.11c) u (7.2.11a) kompletirao opservablama $\hat{K}_1^{(z)}$, $\hat{K}_2^{(z)}$, u (7.2.11b) se (7.2.11c) dopunjuje sa $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$, mada je $\hat{K}_z$ funkcija od $\hat{K}_1^{(z)}$ i $\hat{K}_2^{(z)}$ i kompatibilna je sa njima.

U (7.2.11a) $\hat{K}_z$ nije naznačena (iako je implicitno prisutna), jer je funkcija prethodnih; međutim, kada odustajemo od $\hat{K}_1^{(z)}$ i $\hat{K}_2^{(z)}$ (pri prelasku (7.2.11d)), $\hat{K}_z$ ostaje u skupu opservabli i to više nije suvišna, nego je jedna od onih koje definišu potpuni skup (7.2.11b).

7.2.6 *Rotacije u kompozitnom prostoru

Da vidimo sad šta za rotacije znači prelazak sa bazisa (7.2.1) na bazis (7.2.2).

Kad se rotacije $\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = \hat{U}_1(\phi\mathbf{u}) \otimes \hat{U}_2(\phi\mathbf{u})$ u $\mathcal{H}_{12}$ (uporediti (7.1.15)) reprezentuju u bazisu (7.2.1), dobijaju se matrični elementi

$$\langle k_1 m_1 \lambda_1 \mid \langle k_2 m_2 \lambda_2 \mid \hat{U}_1(\phi\mathbf{u})\hat{U}_2(\phi\mathbf{u}) \mid k_1 m_1' \lambda_1 \rangle \mid k_2 m_2' \lambda_2 \rangle = U^{(k_1)}_{m_1 m_1'}(\phi\mathbf{u}) U^{(k_2)}_{m_2 m_2'}(\phi\mathbf{u}). \tag{7.2.12}$$

Za odgovarajuće matrice se kaže da su direktni proizvod i piše se $U^{(k_1)}(\phi\mathbf{u}) \otimes U^{(k_2)}(\phi\mathbf{u})$.

Prelaskom na bazis (7.2.2) matrični reprezententi operatora rotacija u $\mathcal{H}_{12}$ postaju kvazidijagonalni (uporediti T 6.4.1). Podrazumevajući prelazak sa reprezentacije u bazisu (7.2.1) na reprezentaciju u bazisu (7.2.2) rotacione grupe $\{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) | \phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}\}$ u $\mathcal{H}_{12}$, simbolički se piše

$$U^{(k_1)}(\phi\mathbf{u}) \otimes U^{(k_2)}(\phi\mathbf{u}) \to \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} U^{(k)}(\phi\mathbf{u}). \tag{7.2.13}$$

Da bismo tačno razumeli šta se dešava sa rotacijama u bazisu (7.2.1) i (7.2.2), i tako dali precizniji sadržaj relaciji (7.2.13), napišimo reprezentovanje u vidu supervektora

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u})(1) = (U^{(k_1)}(\phi\mathbf{u}) \otimes U^{(k_2)}(\phi\mathbf{u}))^T (1), \tag{7.2.14}$$

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u})(2) = (\oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} U^{(k)}(\phi\mathbf{u}))^T (2). \tag{7.2.15}$$

Kao što znamo iz § 6.10.6, pod supervektorom se podrazumeva kolona vektora iz izvešnog Hilbert-ovog prostora (u našem slučaju iz $\mathcal{H}_{12}$). Sa (1) obeležavamo kolonu od vektora bazisa (7.2.1), a sa (2), označavamo kolonu od vektora bazisa (7.2.2). Pod primenom operatora na supervektor podrazumevamo primenu operatora na svaki vektor u koloni, a primena brojne matrice znači množenje dve matrice po pravilima matričnog množenja (naš supervektor je matrica tipa $(2k_1+1)(2k_2+1) \times 1$). Direktni zbir matrica $\oplus U^{(k)}(\phi\mathbf{u})$ je kvazidijagonalna matrica na čijoj se dijagonali nalaze podmatrice $U^{(k)}(\phi\mathbf{u})$, $k = |k_1 - k_2|, \ldots, k_1 + k_2$. Najzad, T označava transponovanje.

Znači, (7.2.14) i (7.2.15) iskazuju reprezentovanje operatora rotacija u bazisu (7.2.1) odnosno (7.2.2). S druge strane imamo (uporediti (7.2.6)):

$$(2) = M(1). \tag{7.2.16}$$

Množeći (7.2.14) sa leva matricom M, imajući u vidu da (matrica brojeva) M i operator $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ komutiraju u primeni na supervektor i ubacujući $M^{-1}M$ ispred (1) na desnoj strani od (7.2.14), dobijamo na osnovu (7.2.16)

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u})(2) = M(U^{(k_1)}(\phi\mathbf{u}) \otimes U^{(k_2)}(\phi\mathbf{u}))^T M^{-1}(2). \tag{7.2.17}$$

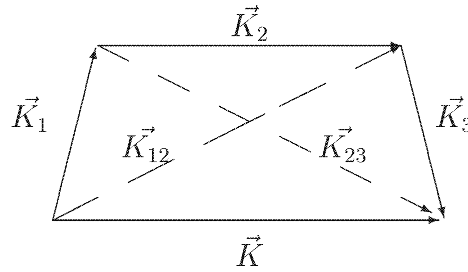
Pošto je (2) bazis, vektori se po njemu razvijaju jednoznačno, stoga iz (7.2.15) i (7.2.17) sledi

$$(\oplus_k U^{(k)}(\phi\mathbf{u}))^T = M(U^{(k_1)}(\phi\mathbf{u}) \otimes U^{(k_2)}(\phi\mathbf{u}))^T M^{-1}. \tag{7.2.18}$$

Pošto je M unitarna i realna matrica, $M^{-1} = M^T$ i tako transponovanjem matrične jednakosti (7.2.18) i izmenom leve i desne strane najzad sledi

$$M(U^{(k_1)}(\phi\mathbf{u}) \otimes U^{(k_2)}(\phi\mathbf{u}))^T M^{-1} = \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} U^{(k)}(\phi\mathbf{u}), \quad \forall \phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}. \tag{7.2.19}$$

Matrična jednakost (7.2.19) je tačan iskaz simbolične relacije (7.2.13) i naziva se *Clebsch-Gordan-ovom serijom.* Na jeziku teorije grupa radi se o dekompoziciji proizvoda dve ireducibilne reprezentacije grupe rotacija na ireducibilne reprezentacije.



Slika 7.5: Različiti načini sprezanja tri uglovna momenta.

7.2.7 $6j$-, $9j$- itd. koeficijenti

U slučaju slaganja tri uglovna momenta $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2 + \hat{\mathbf{K}}_3$, imamo više mogućnosti sukcesivnog sprezanja (uporediti § 7.1.6). To je irelevantno za spektre od $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_z$, ali je itekako važno za odgovarajuće standardne bazise za $\hat{\mathbf{K}}$, jer intermedijerni uglovni momenti pri sprezanju daju kvantne brojeve koji dopunjuju osnovne kvantne brojeve k_1, k_2, k_3, k i m.

Na Crtežu C 7.5 su simbolično prikazane dve mogućnosti: intermedijerni $\hat{\mathbf{K}}_{12} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$ i intermedijerni $\hat{\mathbf{K}}_{23} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{K}}_2 + \hat{\mathbf{K}}_3$.

Standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}}$ sa $\hat{\mathbf{K}}_{12}^2$ može da se razvije po standardnom bazisu za $\hat{\mathbf{K}}$ sa $\hat{\mathbf{K}}_{23}^2$. Koeficijenti u unitarnoj matrici razvoja povezani su tzv. Wigner-ovim $6j$-koeficijentima na sledeći način (obično se piše j umesto k):

$$\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_{12} \\ k_3 & k & k_{23} \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{k_1+k_2+k_3+k}}{\sqrt{(2k_{12}+1)(2k_{23}+1)}} \langle\, (k_1k_2)k_{12}k_3k \mid k_1(k_2k_3)k_{23}k \rangle. \tag{7.2.20}$$

Sleve strane je $6j$-koeficijent, k_{12} je, na primer, kvantni broj od $\hat{\mathbf{K}}_{12}^2$ itd., a poslednji izraz u (7.2.20) je matrični element u pomenutoj matrici razvoja (u kome su irelevantni kvantni brojevi ispušteni).

Ekvivalentno, vektori jednog od pomenutih standardnih bazisa za $\hat{\mathbf{K}}$ razvijaju se po drugom na sledeći način:

$$\mid (k_1k_2)k_{12}k_3km \,\rangle = \sum_{k_{23}} (-1)^{k_1+k_2+k_3+k} \sqrt{(2k_{12}+1)(2k_{23}+1)} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_{12} \\ k_3 & k & k_{23} \end{pmatrix} \mid k_1(k_2k_3)k_{23}km \,\rangle \tag{7.2.21}$$

(gde su eventualni dodatni kvantni brojevi u vektorima ispušteni).

Analogno, pri slaganju 4 uglovna momenta pojavljuju se $9j$-koeficijenti $\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_{12} \\ k_3 & k_4 & k_{34} \\ k_{13} & k_{24} & k \end{pmatrix}$ itd.

U $6j$-, $9j$- itd. koeficijentima kvantni brojevi koje mi pišemo sa k_1, k_2 itd. mogu se odnositi na bilo koje realizacije opšteg uglovnog momenta.

7.2.8 *DODATAK - Dokaz da CG-koeficijenti ne zavise od dodatnih kvantnih brojeva

Sad dokazujemo Teorem T 7.2.1.

Neka su λ_1' i $\bar{\lambda}_1$ kao i λ_2' i $\bar{\lambda}_2$ arbitrerne fiksirane vrednosti iz intervala $\lambda_1 = 1, 2, \ldots, d_{k_1}$, $\lambda_2 = 1, 2, \ldots, d_{k_2}$. Neka su u višestrukim ireducibilnim potprostorima $\mathcal{V}_1^{(k_1)} \subseteq \mathcal{H}_1$ i $\mathcal{V}_2^{(k_2)} \subseteq \mathcal{H}_2$ (po potrebi podsetiti se dijagrama „ormar sa fiokama" C 6.2) definisani sledeći unitarni operatori

$$\hat{U}_1 \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \mid k_1 m_1 \bar{\lambda}_1 \rangle, & \text{ako je } \lambda_1 = \lambda_1' \\ \mid k_1 m_1 \lambda_1' \rangle, & \text{ako je } \lambda_1 = \bar{\lambda}_1 \\ \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle, & \text{inače} \end{cases} ; \tag{7.2.22a}$$

$$\hat{U}_2 \mid k_2 m_2 \lambda_2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \mid k_2 m_2 \bar{\lambda}_2 \rangle, & \text{ako je } \lambda_2 = \lambda_2' \\ \mid k_2 m_2 \lambda_2' \rangle, & \text{ako je } \lambda_2 = \bar{\lambda}_2 \\ \mid k_2 m_2 \lambda_2 \rangle, & \text{inače} \end{cases} , \tag{7.2.22b}$$

za sve m_1, m_2, λ_1, λ_2. Gledajući dijagram C 6.2, možemo reći da ovi operatori transponuju λ'-tu i $\bar{\lambda}$-tu kolonu tačkica, a sve ostale tačkice se menjaju.

Sada hoćemo da dokažemo da važi $[\, \hat{U}_1, \hat{\mathbf{K}}_1 \,] = 0$ u $\mathcal{V}_1^{(k_1)}$, ili ekvivalentno $\hat{U}_1 \hat{\mathbf{K}}_1 \hat{U}_1^{-1}$. A ova jednakost važi ako i samo ako su operatori sleve i zdesne strane jednakosti reprezentovani u standardnom bazisu u $\mathcal{V}_1^{(k_1)}$ jednom te istom matricom (uporediti S 6.3.1). A ovo je stvarno tako, kao što se čitalac može lako uveriti na osnovu (7.2.22a) i činjenice da je matrični reprezentent $\hat{\mathbf{K}}_1$ kvazidijagonalan po λ_1 i da su podmatrice na dijagonali koje odgovaraju različitim λ_1 (a istim k_1) jednake (videti (6.3.10)-(6.3.12) kao i iznad i ispod C 6.3).

Analogno dokazujemo odgovarajuću relaciju komutiranja u $\mathcal{V}_2^{(k_2)}$. Dakle,

$$[\, \hat{U}_1, \hat{\mathbf{K}}_1 \,] = 0 \text{ u} \mathcal{V}_1^{(k_1)}, \ [\, \hat{U}_2, \hat{\mathbf{K}}_2 \,] = 0 \text{ u} \mathcal{V}_2^{(k_2)}, \tag{7.2.23a,b}$$

Pišući $\hat{U}_1 \hat{U}_2$ umesto $\hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2$ iz (7.2.23) i definicije $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$ sledi

$$[\, \hat{U}_1 \hat{U}_2, \hat{\mathbf{K}} \,] = 0 \text{ u } \mathcal{V}_1^{(k_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2)}. \tag{7.2.24}$$

Zadatak 7.2.2 Pokazati da unitarni operator koji komutira sa $\hat{\mathbf{K}}$ nužno prevodi standardan bazis za $\hat{\mathbf{K}}$ u isti takav.

Iz (7.2.22) proizlazi da $\hat{U}_1 \hat{U}_2$ preslikava potprostor $\mathcal{V}_1^{(k_1 \lambda_1')} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2 \lambda_2')}$ na potprostor $\mathcal{V}_1^{(k_1 \bar{\lambda}_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2 \bar{\lambda}_2)}$. Primenjujući $\hat{U}_1 \hat{U}_2$ na (7.2.6a) u prvom od pomenutih potprostora od $\mathcal{H}_{12}$, dobijamo

$$\hat{U}_1 \hat{U}_2 \mid km \rangle = \sum_{m_1, m_2} M_{km, m_1 m_2} (\hat{U}_1 \mid m_1 \rangle)(\hat{U}_2 \mid m_2 \rangle) \tag{7.2.25}$$

u $\mathcal{V}_1^{(k_1 \bar{\lambda}_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2 \bar{\lambda}_2)}$. Iz (7.2.24) i Zadatka Z 7.2.2 je jasno da je na levoj strani od (7.2.25) standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}}$. Pitamo se da li je zadovoljena i konvencija (7.2.3).

Konvencija (7.2.3) znači $M_{k, m=k, m_1=k_1, m_2=k-k_1} > 0, \ \forall k$. Matrica M je ista u oba pomenuta potprostora od $\mathcal{H}_{12}$, prema tome, pošto je ovaj uslov zadovoljen u prvom od njih, zadovoljen je

i u drugom. Pri tome, naravno, treba imati na umu da bazisi $\{\hat{U}_1 \mid m_1\rangle|\forall m_1\}$, $\{\hat{U}_2 \mid m_2\rangle|\forall m_2\}$ indukuju bazis (7.2.1) u $\mathcal{V}_1^{(k_1\bar{\lambda}_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\bar{\lambda}_2)}$, kao što sledi iz (7.2.22).

Dakle, $\{\hat{U}_1\hat{U}_2 \mid km\rangle|\forall m, \forall k\}$ je stardardan bazis i u užem smislu uslova (7.2.3) u pomenutom potprostoru, tj. on je baš bazis (7.2.2), jer je ovaj definisan jednoznačno u odnosu na bazis (7.2.1). Znači, matrica razvoja M bazisa (7.2.2) po bazisu (7.2.1) je ista u $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1')} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2')}$ i u $\mathcal{V}_1^{(k_1\bar{\lambda}_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\bar{\lambda}_2)}$, tj. CG-koeficijenti ne zavise od konkretnih vrednosti dodatnih kvantnih brojeva λ_1 i λ_2.

7.3 Primeri slaganja uglovnih momenata

Ovaj odeljak je posvećen ilustracijama teorije uglovnog momenta. Diskutovaćemo dvočestični spin fermiona za $s = \frac{1}{2}$; ukupni uglovni moment takvog fermiona; razne vidove nuklearne interakcije koje dozvoljava simetrija; model ljuski atomskih omotača i jezgara i pitanje vezanosti dvo-nukleonskog stanja.

7.3.1 Spin dve čestice sa $s = \frac{1}{2}$

Počećemo sa jednim primerom koji je zajednički za atomsku i nuklearnu fiziku. Proučićemo ukratko kako se dobija spin dva elektrona ili dva nukleona („nukleon" je zajednički naziv za proton i neutron).

-1	·	
$M_S = 0$	·	$V(S=1)$
1	·	
$M_S = 0$	·	$V(S=0)$

Slika 7.6: **Razlaganje spinskog faktor prostora stanja $\mathcal{H}_{12}^{(s)}$ dve čestice.**

Spinski prostor dve čestice spina $s = \frac{1}{2}$ je $\mathcal{H}_{12}^{(s)} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_1^{(s)} \otimes \mathcal{H}_2^{(s)}$. U njemu je definisan spinski uglovni moment $\hat{\mathbf{S}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$. Pošto $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$, zakon slaganja (7.1.10) daje: $S = 0, 1$ (videti Crtež C 7.6).

Vektori standardnog bazisa za $\hat{\mathbf{S}}$ (tačkice na Crtežu C 7.6 — to je bazis (7.2.2)) pišu se $\mid SM_s\rangle$, a njihovo razvijanje po nekorelisanom bazisu (bazisu (7.2.1)) $\{\mid m_{s_1}\rangle \mid m_{s_2}\rangle | m_{s_1}, m_{s_2} = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$ glasi

$$\mid 00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mid \frac{1}{2}\rangle \mid -\frac{1}{2}\rangle - \mid -\frac{1}{2}\rangle \mid \frac{1}{2}\rangle), \tag{7.3.1}$$

$$\mid 1\,1\rangle = \mid \frac{1}{2}\rangle \mid \frac{1}{2}\rangle, \ \mid 1\ -1\rangle = \mid -\frac{1}{2}\rangle \mid -\frac{1}{2}\rangle, \tag{7.3.2a,b}$$

$$\mid 1\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mid \frac{1}{2}\rangle \mid -\frac{1}{2}\rangle + \mid -\frac{1}{2}\rangle \mid \frac{1}{2}\rangle). \tag{7.3.2c}$$

Prvi CG-koeficijent u (7.3.1) i CG-koeficijent u (7.3.2a) ilustruju važenje uslova (7.2.3). Stanja $\mid 1, -1\rangle$, $\mid 1\,0\rangle$ i $\mid 1\,1\rangle$ čine triplet (specijalni slučaj $(2k+1)$-članog multipleta $\{\mid km\lambda\rangle | m = -k, \ldots, k\}$), a stanje $\mid 0\,0\rangle$ predstavlja singlet. Uobičajeno je da se bilo koje stanje sa $S = 1$ naziva *tripletnim*, a stanje sa $S = 0$ *singletnim*.

Zadatak 7.3.1 Pokazati da u $\mathcal{H}_{12}^{(s)}$ važe relacije

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{\hbar^2}{2}(3 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2), \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = \frac{2}{\hbar^2}\hat{\mathbf{S}}^2 - 3. \tag{7.3.3a,b}$$

Zadatak 7.3.2 Ako sa $\hat{P}^{(3)}$ i $\hat{P}^{(1)}$ obeležimo projektore na svojstvene potprostore $V(S=1)$ (tripletni) odnosno $V(S=0)$ (singletni) od $\hat{\mathbf{S}}^2$ u $\mathcal{H}_{12}^{(s)}$ pokazati da važi

$$\hat{P}^{(3)} = \frac{1}{2\hbar^2}\hat{\mathbf{S}}^2, \quad \hat{P}^{(1)} = 1 - \frac{1}{2\hbar^2}\hat{\mathbf{S}}^2. \tag{7.3.4a,b}$$

Dokaz izvesti na sledeća dva načina: iz spektralne forme od $\hat{\mathbf{S}}^2$ i primenom na standardni bazis za $\hat{\mathbf{S}}$.

Iz (7.3.3b) i (7.3.4b) odmah sledi

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = 4\hat{P}^{(3)} - 3 = 1 - 4\hat{P}^{(1)}. \tag{7.3.5a,b}$$

Ova relacija će nam biti od pomoći u paragrafu § 7.3.3.

7.3.2 Slaganje orbitnog i spinskog uglovnog momenta elektrona ili nukleona

Pretpostavimo da imamo česticu spina $s = \frac{1}{2}$ u svojstvenom stanju orbitnog uglovnog momenta $\hat{\mathbf{l}}^2$. Onda vektor stanja čestice pripada prostoru $\mathcal{V}^{(l)} \otimes \mathcal{H}_s$, gde je $\mathcal{V}^{(l)} \subset \mathcal{L}^2(\Omega)$ potprostor koji obrazuju 2l+1 sfernih harmonika $\{Y_l^m(\theta,\phi) | m = -l, \ldots, l\}$. Ovo je realizacija potprostora $\mathcal{V}_1^{(k_1\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2\lambda_2)}$ iz opšte teorije (izložene u § 7.1 i § 7.2). Ne pojavljuju se λ_1 i λ_2 jer nema ekstra degeneracije, a $k_1 = l$ i $k_2 = s = \frac{1}{2}$.

$\mathcal{V}_{1/2}$ $\mathcal{V}_{3/2}$ $\mathcal{V}_{5/2}$
l | $\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\ m_j$ | $\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\ -\frac{3}{2}\ m_j$ | $\frac{5}{2}\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\ -\frac{3}{2}\ -\frac{5}{2}\ m_j$
0 s | ⊗ ⊗
1 p | • • | ⊗ • • ⊗
2 d | | • • • • | ⊗ • • • • ⊗
3 f | | | • • • • • •

Slika 7.7: **Razlaganje uglovno-spinskog prostora** *na višestruke ireducibilne potprostore za* $\hat{\mathbf{j}}$. *Tačke predstavljaju vektore standardnog bazisa (spinski sferni harmonici), među kojima su nekorelisani vektori (proizvodi standardnih vektrora za* $\hat{\mathbf{l}}$ *i* $\hat{\mathbf{s}}$*) naglašeni znakom* $\otimes$.

Standardni bazis za ukupni uglovni moment čestice $\hat{\mathbf{j}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$ u $\mathcal{V}^{(l)} \otimes \mathcal{H}_s$ čine sledećih $2(2l+1)$ tzv. *spinskih sfernih harmonika* (ako je $l \geq 1$):

$$\begin{aligned} \langle\, \theta, \varphi, m_s' \mid ljm_j \rangle = \phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,m_s') = (l, s=\frac{1}{2}, m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} | jm_j) \times \\ \times Y_l^{m_l = m_j - \frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\chi_{m_s=\frac{1}{2}}(m_s') + (l, s=\frac{1}{2}, m_l = m_j + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} | jm_j) \times \\ \times Y_l^{m_l = m_j + \frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\chi_{m_s=-\frac{1}{2}}(m_s'), \quad m_j = -j, \ldots, j, \ \ j = l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{7.3.6}$$

Funkcije $\chi_{m_s}(m'_s)$ su svojstvene funkcije z-projekcije spina u reprezentaciji iste opservable. Moglo bi se pisati $\chi_{m_s}(m'_s) = \delta_{m_s,m'_s}$, ali u literaturi je χ više uobičajeno.

Ako je čestica u tzv. s-stanju, tj. ako je $l = 0$, onda postoji samo jedna mogućnost za j, jer $|0 - \frac{1}{2}| = 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$. Inače, kao što je naznačeno u (7.3.6), uvek postoje dve mogućnosti: $l - \frac{1}{2}$ i $l + \frac{1}{2}$.

Zadatak 7.3.3 Napisati analogon od (7.3.6) za pomenuto s-stanje.

Celokupni uglovno-spinski prostor stanja čestice je

$$\mathcal{L}^2(\Omega) \otimes \mathcal{H}_s = (\oplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{V}^{(l)}) \otimes \mathcal{H}_s = \oplus_{l=0}^{\infty} (\mathcal{V}^{(l)} \otimes \mathcal{H}_s) \tag{7.3.7}$$

i spinski sferni harmonici

$$\{\phi_{ljm_j}(\theta, \varphi, m'_s) | m_j = -j, \ldots, j; \; j = l - \frac{1}{2}, \; l + \frac{1}{2}; \; l = 0, 1, \ldots\} \tag{7.3.8}$$

su standardni bazis za $\hat{\mathbf{j}}$ u tom prostoru. Kada uglovno-spinski prostor čestice razložimo na *višestruke invarijantne ireducibilne potprostore* za $\hat{\mathbf{j}}$, dolazimo do sledećeg rezultata:

$$\mathcal{L}^2(\Omega) \otimes \mathcal{H}_s = \oplus_{j=\frac{1}{2}}^{\infty} \mathcal{V}_j; \; \mathcal{V}_j = \mathcal{V}_{l=j-\frac{1}{2}} \oplus \mathcal{V}_{l=j+\frac{1}{2}}, \; j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots \tag{7.3.9a,b}$$

Razlaganje (7.3.9b) je ilustracija za (7.1.14b); pošto je $s = \frac{1}{2}$ stalno fiksirano, za dato j dozvoljene l je najlakše izračunati iz pravila trougla (7.2.5d). Razlaganje (7.3.9) je dijagramatski prikazano na Crtežu C 7.7.

Na Crtežu C 7.7 je zanimljivo da l preuzima ulogu λ iz opšte teorije. Naime, sa gledišta teorije jednog uglovnog momenta (a to je ovde j) l je ekstra kvantni broj. Ali sa gledišta slaganja uglovnih momenata l nije ekstra kvantni broj, nego neophodni sastavni deo teorije.

Zadatak 7.3.4 Napisati kako eksplicitno glase funkcije (u stvari 2×1 brojne kolone, elementi od C^2) χ_{m_s} koje reprezentuju vektore standardnog bazisa $\{|+\rangle, |-\rangle\} \subset \mathcal{H}_s$ za $\hat{\mathbf{s}}$ u tom istom bazisu.

7.3.3 Interakcija dva nukleona

Interakcija dva nukleona se u teoriji elementarnih čestica naziva jakom interakcijom, a u nuklearnoj fizici nuklearnom interakcijom. Zakon ove interakcije, tj. operator dvo-nukleonskog potencijala, nije poznat u tačnoj formi za razliku od, na primer, zakona elektromagnetne interakcije dva elektrona (ili dva protona), tj. od Coulomb-ovog zakona.

U ovakvom slučaju nastoji se da se iz prvih principa (a to su simetrije) što više ograniči moguća forma interakcije. Preostala sloboda u izboru interakcije se onda koristi za tzv. *fitovanje* eksperimentalnih podataka (engleski *fitting* znači usklađivanje, prilagođavanje). To znači da se forma interakcije definiše tako da teorija reprodukuje eksperimentalne činjenice.

Što se tiče interakcije dva nukleona, Wigner i Eisenbud (čitati: Ajzenbad) su izvršili pomenutu analizu iz principa simetrije[7.3.1] i zaključili da se pojavljuje svega nekoliko vrsta interakcije, od kojih su najvažnije:

[7.3.1] L. Eisenbud and E.P. Wigner, *Proceedings of the National Academy of Sciences U.S.*, **27**, 281 (1941); savremeniji prikaz u 6-om odeljku 4-te glave treće reference u 5.1.4.

i) *spinski nezavisna* interakcija $V_1(r)$ (r je norma radijus vektora relativne čestice); i tri vrste spinski zavisne interakcije:

ii) *skalarna*

$$V_2(r)(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2) \tag{7.3.10}$$

(indeks potencijala prebrojava potencijale, indeksi Pauli-jevih matrica se odnose na prvi i drugi nukleon);

iii) *vektorska*

$$\frac{1}{\hbar^2}V_3(r)(\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) \tag{7.3.11}$$

($\hat{\mathbf{l}}$ je orbitni uglovni moment relativne čestice i istovremeno ukupni orbitni uglovni moment dva nukleona u odnosu na CM; $\hat{\mathbf{S}} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\hbar}{2}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)$ je ukupni spin dva nukleona);

iv) *tenzorska*

$$V_4(r)[\frac{3}{r^2}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2] \tag{7.3.12}$$

($\hat{\mathbf{r}}$ je operator radijus vektora relativne čestice, a r je moduo njene svojstvene vrednosti; (7.3.10)-(7.3.12), su pisani u koordinatnoj reprezentaciji, tj. deluju u prostoru stanja $\mathcal{L}^2(\mathbf{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbf{r}) \otimes \mathcal{H}_1^{(s)} \otimes \mathcal{H}_2^{(s)}$ dva nukleona.

Termini skalarni, vektorski odnosno tenzorski, odnose se na karakter dotičnog operatora interakcije u spinskom faktor prostoru $\mathcal{H}_1^{(s)} \otimes \mathcal{H}_2^{(s)}$. Naime, dotični operator je ovde skalar, odnosno vektor, odnosno tenzor. (Videćemo u § 7.4 da su (7.3.10) i (7.3.11) ireducibilni, a (7.3.12) opštiji, reducibilni tenzorski operator.)

i) Što se tiče *spinski nezavisne interakcije*, ona deluje netrivijalno samo u radijalnom faktor prostoru relativne čestice i stoga proizvoljni potpuni skup kompatibilnih opservabli u uglovno-spinskom faktor prostoru $\mathcal{L}^2(\Omega_{\text{RČ}}) \otimes \mathcal{H}_1^{(s)} \otimes \mathcal{H}_2^{(s)}$ može da dopuni operator interakcije do potpunog skupa kompatibilnih opservabli u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}) \otimes \mathcal{H}_{12}^{(s)}$. Dve najvažnije mogućnosti takvog dopunskog potpunog skupa su $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{l}_z$, $\hat{\mathbf{S}}^2$ i $\hat{S}_z$ i $\hat{\mathbf{l}}^2$, $\hat{\mathbf{S}}^2$, $\hat{\mathbf{J}}^2$ i $\hat{J}_z$. Energija vezivanja[7.3.2] ne zavisi, kao što se odmah vidi, od odgovarajućih kvantnih brojeva m, S, M_S odnosno S, J, M_J.

ii) Na osnovu (7.3.3*b*), (7.3.10) može da se prepiše u vidu

$$V_2(r)(\frac{2}{\hbar^2}\hat{\mathbf{S}}^2 - 3); \tag{7.3.13}$$

ili na osnovu (7.3.5), *operator skalarne spinski zavisne interakcije* može da poprimi vid

$$V_2(r)(4\hat{P}^{(3)} - 3) \quad \text{ili} \quad V_2(r)(1 - 4\hat{P}^{(1)}). \tag{7.3.14a,b}$$

Iz (7.3.13) se vidi da operator interakcije opet komutira bilo sa jednim bilo sa drugim skupom opservabli pomenutim u prethodnom slučaju. Ali sada energija vezivanja zavisi od vrednosti S, tj. različita je u tripletnom i singletnom stanju, kao što se vidi iz (7.3.14).

[7.3.2] Radi pojednostavljenja našeg rezonovanja u ovom paragrafu zanemarujemo kinetičku energiju, spoljašnje polje ostalih nukleona, kao i mogućnost da imamo dva i više sabiraka nuklearne interakcije (od navedenih pod i) do iv)) u hamiltonijanu.

Zadatak 7.3.5 Rešiti svojstveni problem operatora skalarne spinski zavisne interakcije.

iii) Što se tiče *vektorske interakcije* iz

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{S}})^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \tag{7.3.15}$$

odmah sledi da se ovaj operator može prepisati u obliku

$$V_3(r)\frac{1}{2\hbar^2}(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2). \tag{7.3.16}$$

Zbog nekomutiranja $\hat{l}_z$ i $\hat{S}_z$ sa $\hat{\mathbf{J}}^2$, u prisustvu ove interakcije $l_{m_l S M_S}$-reprezentacija za uglovno-spinske stepene slobode sistema nije dobra, tj. ne dopunjuje se sa samom energijom veze u skup kompatibilnih opservabli. Ali $lSJM_J$-reprezentacija i dalje sasvim zadovoljava, samo što energija veze sad zavisi od J, l i S.

Zadatak 7.3.6 Rešiti svojstveni problem operatora vektorske interakcije.

iv) Najzad, da bismo pogodno transformisali vid *tenzorske interakcije*, pođimo od jednakosti

$$\frac{1}{\hbar^2}(\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 = \frac{1}{4}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 = \frac{1}{4}[(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 + (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 + 2(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}})]. \tag{7.3.17}$$

Kao što smo rekli, imamo u vidu radijus-vektorsku reprezentaciju relativne čestice, stoga multiplikativni operator $\hat{\mathbf{r}}$ možemo da pišemo u vidu $r\mathbf{r}_0$, gde je $\mathbf{r}_0$ ort od $\mathbf{r}$. Onda, na primer, $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 = r^2(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_0)^2 = r^2$, jer dok $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_0)$ ima dve svojstvene vrednosti ± 1, kvadrat tog operatora ima samo jednu i to $+1$. Analogno, $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 = r^2$. Tako (7.3.17) postaje $\frac{1}{\hbar^2}(\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 = \frac{1}{2}[(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) + r^2]$, što dovodi do

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) = \frac{2}{\hbar^2}(\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 - r^2. \tag{7.3.18}$$

Pomoću (7.3.18) i (7.3.3b) operator tenzorske interakcije prepisujemo u vidu

$$\frac{2}{\hbar^2}V_4(r)[\frac{3}{r^2}(\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 - \hat{\mathbf{S}}^2]. \tag{7.3.19}$$

Ako opet napišemo $\hat{\mathbf{r}} = r\mathbf{r}_0$ (multiplikativni operator) i ako sledimo notaciju iz § 6.10.8, onda će (7.3.19) da glasi

$$V_4(r)\frac{2}{\hbar^2}(3\hat{S}_r^2 - \hat{S}^2). \tag{7.3.20}$$

Zadatak 7.3.7 a) Da li su opservable $\hat{S}_r$ koordinatno-helicitetne reprezentacije definisane u spinskom faktor prostoru $\mathcal{H}_{12}^{(s)}$ dvo-nukleonskog prostora $\mathcal{L}^2(\mathbf{R}) \otimes \mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{H}_{12}$?

b) Da li su opservable $\hat{S}_r$ kompatibilne sa $\hat{\mathbf{l}}$ ili sa $\hat{\mathbf{l}}^2$?

Nećemo podrobnije ulaziti u rešavanje svojstvenog problema operatora (7.3.20) pomoću helicitetne reprezentacije.

7.3.4 Jedan elektron u modelu ljuski atomskih omotača

U paragrafima § 7.3.4 i § 7.3.5 otisnućemo se u atomsku fiziku i bacićemo jedan pogled na početak periodnog sistema Mendeljejeva, koji je sve nas od srednjoškolskih dana uzbuđivao i ispunjavao strahopoštovanjem. To je u stvari jedna od najlepših primena kvantne teorije uglovnog momenta.

Kao što ćemo detaljnije videti u teoriji vodoniku-sličnih atoma (odeljak § 9.1), kada u elektronskom omotaču atoma zanemarimo sve elektrone osim jednog, a Coulomb-ovo polje jezgra tretiramo kao spoljašnje polje[7.3.3], hamiltonijan jednog elektrona se može svesti na sledeći oblik:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2m_e r^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{Ze^2}{r} \tag{7.3.21}$$

(uporediti (6.6.17)), gde se za početak koordinatnog sistema uzima središte jezgra.

U odnosu na radijalni i uglovni faktor prostor elektrona, (7.3.21) može da se prepiše u vidu

$$\hat{H} = (\frac{1}{2m_e r^2})_r \otimes (\hat{\mathbf{l}}^2)_\Omega + [-(\frac{\hbar^2}{2m_e r^2})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}) - \frac{Ze^2}{r}]_r \otimes \hat{I}_\Omega. \tag{7.3.22}$$

Opet imamo primer za primenu metoda separacije varijabli (videti § 6.5.5 i § 6.5.6). Ispostavlja se da su radijalne funkcije elektrona $R_{nl}(r)$ svojstveni vektori efektivnog operatora $\hat{H}_{ef}$:

$$[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}) - \frac{Ze^2}{r}]R_{nl}(r) = E_{nl}R_{nl}(r). \tag{7.3.23}$$

Ispostaviće se, takođe, da tzv. glavni kvantni broj n uzima vrednosti $n = 1, 2, \ldots$, a $l = 0, 1, \ldots, n-1$.

Svi kvantni sistemi imaju tendenciju da svoju ukupnu energiju smanje koliko god mogu i postižu to u osnovnom stanju (uporediti § 3.4.10). U aproksimaciji nezavisnih čestica o kojoj je reč (kada se zanemari međusobna interakcija čestica) elektroni, kao što se kaže, popunjavaju najniže nivoe, jer u ovom modelu ukupna energija omotača je zbir jednoelektronskih nivoa.

Pošto jednoelektronski nivoi zavise od n i l, a ne zavise od m_l i m_s, tzv. *podljuske* ili orbite se definišu određenim vrednostima n i l, a broj $(2l+1)(2s+1) = 2(2l+1)$, tj. broj različitih parova m_l, m_s, pokazuje za koliko elektrona ima mesta u jednoj orbiti ili, drugim rečima, koliki je broj dimenzija svojstvenog potprostora od $\hat{H}_{ef}$ koji odgovara E_{nl}. Zbog tzv. Pauli-jevog principa (kao što ćemo videti u § 9.4.4) to je upravo broj elektrona sa kojima se podljuska može popuniti.

7.3.5 Početak periodnog sistema

U Tabeli Tb 7.1 prikazan je početak periodnog sistema hemijskih elemenata. Svi atomi na Tabeli Tb 7.1 su neutralni, broj elektrona u omotaču je Z (kao broj protona u jezgru). Glavni kvantni broj n prebrojava tzv. (*glavne*) *ljuske* ili *periode* periodnog sistema. Pošto l uzima vrednosti od nule do $n-1$, u prvoj ljusci imamo samo jednu podljusku, naime s-stanje elektrona ($l = 0$) sa $m_l = 0$ i $m_s = \pm\frac{1}{2}$. Ova se ljuska stoga popunjava sa dva elektrona. U atomu vodonika imamo

[7.3.3]Kretanje elektrona u omotaču veoma neznatno utiče na kretanje nukleona u jezgru (kao što kretanje zemlje ništavno utiče na kretanje sunca i materije u suncu). Zanemarivši ovako beznačajan *feedback* (čitati: fidbek, znači: povratna sprega), možemo dinamički raspregnuti elektron i jezgro i njihovu interakciju u dobroj približnosti simulirati spoljašnjim poljem.

samo jedan elektron; on je, naravno, u opisanoj prvoj ljusci. Takozvana *konfiguracija*, a to će reći informacija o popunjenosti podljuski, za vodonikov atom glasi $(1s)$, što iskazuje $n = 1$, $l = 0$.

Dekodirajmo spektroskopsku notaciju $^2S_{\frac{1}{2}}$ (u slučaju H). Piše se

$$^{(2S+1)}L_J, \tag{7.3.24}$$

pri čemu se kvantni broj orbitnog momenta L piše tzv. spektroskopskom notacijom, tj. po sledećem kodu

$$L = 0 \Leftrightarrow S, \qquad L = 1 \Leftrightarrow P, \qquad L = 2 \Leftrightarrow D, \qquad L = 3 \Leftrightarrow F, \qquad L = 4 \Leftrightarrow G, \tag{7.3.25}$$

dalje se ide abecednim redom (tj. $L = 5 \Leftrightarrow H$ itd.). Velika slova se koriste za višečestična stanja (za jednočestična se koriste mala slova po istom kodu). U poslednjem stupcu Tabele Tb 7.1 su u stvari naznačeni ukupni spin, ukupni orbitni uglovni moment i sveukupni uglovni moment svih valentnih elektrona, tj. elektrona koji su van popunjenih ljuski i podljuski. Pošto popunjene podljuske imaju sva tri pomenuta uglovna momenta nula (dokazaćemo ovo u T 9.4.4), pri slaganju sa uglovnim momentima valentnih elektrona oni ništa ne menjaju. Dakle, uglovni momenti valentnih elektrona su istovremeno i uglovni momenti celokupnog omotača.

Tabela 7.1: **Početak periodnog sistema.** *Prvo je dat glavni kvantni broj (n); sledi redni broj elementa (Z) i njegov hemijski simbol (HE); treća i četvrta kolona su elektronska kofiguracija i spektroskopska notacija uglovnih momenata. Kompletna Tabela je data na str. 307 udžbenika iz 6.8.3.*

n	Z :	HS	Konfiguracija	$^{2S+1}L_J$
1	1	H	$(1s)$	$^2S_{\frac{1}{2}}$
	2	He	$(1s)^2$	$^1S_0$
2	3	Li	(He)$(2s)$	$^2S_{\frac{1}{2}}$
	4	Be	(He)$(2s)^2$	$^1S_0$
	5	B	(He)$(2s)^2(2p)$	$^2P_{\frac{1}{2}}$
	6	C	(He)$(2s)^2(2p)^2$	$^3P_0$
	7	N	(He)$(2s)^2(2p)^3$	$^4S_{\frac{3}{2}}$
	8	O	(He)$(2s)^2(2p)^4$	$^3P_2$
	9	F	(He)$(2s)^2(2p)^5$	$^2P_{\frac{3}{2}}$
	10	Ne	(He)$(2s)^2(2p)^6$	$^1S_0$
3	11	Na	(Ne)$(3s)$	$^2S_{\frac{1}{2}}$
	12	Mg	(Ne)$(3s)^2$	$^1S_0$
	13	Al	(Ne)$(3s)^2(3p)$	$^2P_{\frac{1}{2}}$
	14	Si	(Ne)$(3s)^2(3p)^2$	$^3P_0$
	15	P	(Ne)$(3s)^2(3p)^3$	$^4S_{\frac{3}{2}}$
	16	S	(Ne)$(3s)^2(3p)^4$	$^3P_2$
	17	Cl	(Ne)$(3s)^2(3p)^5$	$^2P_{\frac{3}{2}}$
	18	Ar	(Ne)$(3s)^2(3p)^6$	$^1S_0$
4	19	K	(Ar)$(4s)$	$^2S_{\frac{1}{2}}$
	20	Ca	(Ar)$(4s)^2$	$^1S_0$
	21	Sc	(Ar)$(4s)^2(3d)$	$^2D_{\frac{3}{2}}$

U slučaju vodonika imamo samo jedan elektron. Podatak $2S + 1$ se čita kao multiplet. Za vodonik se, na primer, kaže da je u dubletnom stanju sa $J = \frac{1}{2}$. U stvari elektron ima $l = 0$, $j = s = \frac{1}{2}$, a velika slova pišemo radi ujednačene notacije.

U slučaju He se prva ljuska popunjava i sva tri njegova dvo-elektronska uglovna momenta su nula, tj. imamo singletno, S-stanje sa $J = 0$: $^1S_0$. U stvari dva elektrona u s-stanju daju dvo-elektronsko S-stanje. Jedan elektron ima $m_s = -\frac{1}{2}$, a drugi $m_s = \frac{1}{2}$. Kao što se vidi u (7.3.2b) i (7.3.1), to je u saglasnosti i sa tripletnim i sa singletnim dvo-elektronskim spinskim stanjem. Međutim, kao što ćemo videti u § 9.5.3, Pauli-jev princip u ovom slučaju zabranjuje tripletno stanje. $L = 0$ i $S = 0$ nužno daju $J = 0$. Zbog popunjene ljuske He je inertan po svom afinitetu za hemijske reakcije.

Konfiguracije atoma u sledećoj periodi ($3 \leq Z \leq 10$) dobijaju se dograđivanjem na konfiguraciju helijuma, kada je naznačena kao (He).

Litijum ima jedan valentni elektron u drugoj ljusci i to u prvoj podljusci ($n = 2$, $l = 0$). Sva tri uglovna momenta ovog elektrona isti su kao kod vodonika i to iz istih razloga.

U omotaču atoma berilijuma je prva podljuska druge ljuske popunjena. U atomu bora imamo jedan valentni elektron u drugoj podljusci (u p-stanju) druge ljuske. Njegovi kvantni brojevi su

direktno prepisani u $^2P_{\frac{1}{2}}$. Od ugljenika do neona se ova podljuska postepeno popunjava. Neon opet ima popunjenu glavnu ljusku i sličan je helijumu. Sa natrijumom počinje sledeća perioda.

Druga i treća perioda su iste dužine iako $n = 3$ dozvoljava pored s- i p-stanja i d-stanje. Ali ispostavlja se da je u funkcionalnoj zavisnosti E_{nl} d-stanje energetski nepovoljno (ima relativno visoku vrednost) i taj se nivo počinje popunjavati[7.3.4] tek kad je podljuska $4s$ popunjena (u Sc-u).

7.3.6 Nuklearni model ljuski

Elektroni u atomskom omotaču nalaze se u Coulomb-ovom polju jezgra. To spoljašnje polje je jednočestičnog tipa: $\sum_{i=1}^{Z} -\frac{Ze^2}{r_i}$, svaki elektron ponaosob oseća polje. Ono dominira nad uzajamnom interakcijom elektrona, koja je dvočestičnog tipa: $\sum_{i<j}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$ (elektroni interaguju po parovima). Na ovaj način dominantno jednočestično polje dovodi (u dobroj aproksimaciji) do važenja modela nezavisnih čestica ili modela ljuski (kad su fermioni u pitanju), čije smo neke rezultate videli u paragrafu § 7.3.5.

Unutar jezgra imamo samo veoma jaku uzajamnu interakciju nukleona i dugo se smatralo besmislicom da se nuklearna struktura pokuša razumeti pomoću modela ljuski. Međutim, 1940. godine, fizičari Maria Göppert-Mayer i (u nezavisnom, istovremeno objavljenom radu) Haxel, Jensen i Suess pokazali su da se u tzv. $j - j$ sprezi, a to znači na jeziku standardnog bazisa za ukupni jedno-nukleonski uglovni moment $\hat{\mathbf{j}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$, nuklearna struktura može u znatnoj meri objasniti pomoću modela ljuski. Pomenuti fizičari su dobili Nobel-ovu nagradu za ovo otkriće.

Na Tabeli Tb 7.2 prikazana je (nekompletna) lista jedno-nukleonskih nivoa u spektroskopskoj notaciji. Energetski je najniži $1s_{\frac{1}{2}}$ (osnovni nivo modela), a uzastopni viši nivoi slede redom (kao što čitamo reči u knjizi). Pojedine vrste nivoa predstavljaju ljuske (ovde nemamo distinkciju ljuski i podljuski), a brojevi u pretposlednjoj koloni kazuju koliko protona (ili umesto toga neutrona) popunjava dotičnu ljusku. Brojevi u poslednjoj koloni iskazuju sa koliko protona (ili neutrona) se popunjuju sve ljuske završno sa dotičnom.

Tabela 7.2: **Jedno-nukleonski nivoi u spektroskopskoj notaciji.**

$1s_{\frac{1}{2}}$	2	2
$1p_{\frac{3}{2}} 1p_{\frac{1}{2}}$	6	8
$1d_{\frac{5}{2}} 2s_{\frac{1}{2}} 1d_{\frac{3}{2}}$	12	20
$1f_{\frac{7}{2}} 2p_{\frac{3}{2}} 1f_{\frac{5}{2}} 2p_{\frac{1}{2}} 1g_{\frac{9}{2}}$	30	50
$2d_{\frac{5}{2}} 1g_{\frac{7}{2}} 3s_{\frac{1}{2}} 1h_{1\frac{1}{2}} 2d_{\frac{3}{2}}$	32	82
$2f_{\frac{7}{2}} 1h_{\frac{9}{2}} 3p_{\frac{3}{2}} 2f_{\frac{5}{2}} 3p_{\frac{1}{2}} 1i_{\frac{13}{2}}$	44	126

Analogon glavnog kvantnog broja n kod elektrona ovde ima prilično fenomenološku ulogu (dodatnog kvantnog broja), prebrojava stanja unutar datog l. Na primer, $1d_{\frac{5}{2}}$ znači (i čita se kao) prvo d-stanje sa $j = \frac{5}{2}$ itd.

Tabela Tb 7.2 se odnosi posebno na protone i posebno na neutrone. Brojevi u poslednjem stupcu nazivaju se *magičnim brojevima*. Jezgra čiji je broj protona (Z) ili broj neutrona (N) magičan, ispoljavaju znatnu stabilnost strukture (setimo se analogije sa plemenitim gasovima). Naročito su stabilna tzv. dvostruko magična jezgra kao što su ${}^4_2\mathrm{He}_2$, ${}^{16}_8\mathrm{O}_8$, ${}^{40}_{20}\mathrm{Ca}_{20}$, ${}^{208}_{82}\mathrm{Pb}_{126}$ (${}^{Z+N}_{Z}\mathrm{simbol}_N$).

Redosled nivoa unutar pojedinih ljuski nije ustaljen, već zavisi od jezgra o kome je reč, tj. od toga koji su nivoi već popunjeni. Ova samousaglašenost modela sa popunjenošću pojavljuje se i u modelu ljuski atomskih omotača, ali mnogo ređe.

[7.3.4] Iskazi u tekstu su simplificirani. Zavisnost od l u E_{nl} se u stvari ne dobija iz (7.3.23), već tek uzimanjem u obzir i dodatnih članova u efektivnom hamiltonijanu (tzv. fina struktura usled spin-orbitnog sprezanja i relativističke korekcije; videti § 9.1.10).

Tamo dominirajuće polje od jezgra obezbeđuje priličnu ustaljenost pomenutog redosleda. Unutar jezgara celokupni jednočestični hamiltonijan čije je svojstveno rešenje model ljuski potiče od samousaglašavanja jedno-nukleonskih stanja sa njihovim delovanjem na ostala stanja. Pitanje modela ljuski i samousaglašavanje proučićemo u § 9.4.3, § 10.4.7 i § 10.4.8.

7.3.7 Deuteron i nezavisnost $p-p$ i $n-n$ stanja

Postoji samo jedno vezano stanje dva nukleona, a to je deuteron (jezgro deuterijuma ili atoma teškog vodonika), koji se sastoji od protona i neutrona. uglovni momenti deuterona glase ${}^3S_1$ (ista spektroskopska notacija kao u atomima) sa malom primesom ${}^3D_1$ stanja[7.3.5].

Kao što ćemo videti u § 9.5.3, tripletno S-stanje ove čestice kao što su nukleoni je simetrično (u pogledu uzajamne zamene koordinata) kako u spinskom dvočestičnom prostoru tako i u orbitnom dvočestičnom prostoru. Proton i neutron su različive čestice, za njih ne važi Pauli-jev princip i stoga njima to stanje nije zabranjeno. Međutim dva protona (sitem $p-p$) ili dva neutrona (sistem $n-n$) su identične ili nerazličive čestice. Za njih važi Pauli-jev princip, a on zabranjuje tripletno S-stanje. Samo u tom stanju je interakcija (koja je spinski zavisna) dovoljno jaka da daje vezano stanje. Zato u prirodi ne postoji vezano stanje dva protona ili dva neutrona.

7.4 Ireducibilni tenzorski operatori i Wigner-Eckart-ov teorem

U ovom odeljku formalizam kvantne teorije uglovnog momenta će da kulminira u proširenju ideje standardnog bazisa i na operatore, kako bismo mogli što više olakšati izračunavanje matričnih elemenata (a preko njih ide gotovo sva primena kvantne mehanike). Tako se upotpunjuje i zaokrugljuje aparat reprezentacije uglovnog momenta, a standardni bazis je to u suštini.

Definisaćemo pojam ireducibilnog tenzorskog operatora i proučićemo najvažniji specijalni slučaj, vektorski operator. Prodiskutovaćemo jednu važnu primenu vektorskih operatora uglovnog momenta u tzv. $j-j$ i $L-S$ sprezanju. Formulisaćemo i dokazaćemo Wigner-Eckart-ov teorem, koji konkretizuje pomenuto pojednostavljenje izračunavanja matričnih elemenata. Preko izvesnih pomoćnih rezultata primenićemo ovaj teorem na proučavanja Zeeman-ovog efekta atomskog omotača.

7.4.1 *Ireducibilni tenzorski operatori

Neka je $\mathcal{H}$ neki Hilbert-ov prostor u kome je zadat vektorski operator uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}$ i odgovarajuća rotaciona grupa $\{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}}|\phi\mathbf{u}$ iz π-lopte$\}$. Onda svakih $2k+1$ operatora $\hat{T}^{(k)}_m$, $m=-k,-k+1,\dots,k$ u $\mathcal{H}$ nazivamo *standardnim komponentama ireducibilnog tenzorskog operatora* k*-tog reda* ako

$$\boxed{\hat{U}(\phi\mathbf{u})\hat{T}^{(k)}_m\hat{U}^{-1}(\phi\mathbf{u}) = \sum_{m'=-k}^{k} U^{(k)}_{m'm}(\phi\mathbf{u})\hat{T}^{(k)}_{m'},\quad m=-k,\dots,k}, \tag{7.4.1a}$$

[7.3.5]Ovde *primesa* ne znači da je deuteron u mešanom stanju. On je u čistom stanju, a pomenuta stanja su koherentno pomešana, tj. pojavljuju se u superpoziciji.

$$\boxed{k \doteq 0,\ 1,\ ...} \tag{7.4.1b}$$

(razlog za izastavljanje polucelih k saznaćemo u sledećem odeljku).

Upoređenje (7.4.1a) i (6.4.5) pokazuje da operatori $\{\hat{T}_m^{(k)}|m=-k,\ldots,k\}$ čine standardan bazis u odnosu na rotiranja operatora. Ovu ćemo primedbu razraditi u Dodatku 1, § 7.4.5

Definicija (7.4.1) može se zameniti ekvivalentnom definicijom u kojoj se operatori $\hat{T}_m^{(k)}$ reliraju sa $\hat{\mathbf{K}}$:

$$\boxed{[\ \hat{K}_z, \hat{T}_m^{(k)}\ ] = m\hbar\hat{T}_m^{(k)}, \quad [\ \hat{K}_\pm, \hat{T}_m^{(k)}\ ] = (k(k+1)-m(m\pm 1))^{\frac{1}{2}}\hbar\hat{T}_{m\pm 1}^{(k)}}, \tag{7.4.2a,b}$$

$$\boxed{m\ =\ -k,\ldots,k}. \tag{7.4.2c}$$

Kada (7.4.2) uporedimo sa (6.2.21c) i (6.3.14c, 6.3.14d), vidimo da je $\{\hat{T}_m^{(k)}|m=-k,\ldots,k\}$ standardni bazis u odnosu na superoperator $[\hat{\mathbf{K}},\ldots]$ (operator koji deluje na operatore u $\mathcal{H}$), koji igra ulogu superoperatora uglovnog momenta za superoperatore rotacija $\hat{U}(\phi\mathbf{u})\ldots\hat{U}^{-1}(\phi\mathbf{u})$. Da je to stvarno tako, kao i dokaz ekvivalentnosti (7.4.1) i (7.4.2), biće dato u Dodatku 1, § 7.4.6.

Definicija (7.4.1a) se u specijalnom slučaju ireducibilnog tenzorskog operatora nultog reda svodi na $\hat{U}(\phi\mathbf{u})\hat{T}_{m=0}^{(k=0)}\hat{U}^{-1}(\phi\mathbf{u}) = \hat{T}_{m=0}^{(k=0)}$ ili na ekvivalentnu jednakost

$$[\ \hat{T}_0^{(0)}, \hat{U}(\phi\mathbf{u})\ ] = 0,\ \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}. \tag{7.4.3}$$

Operatore koji zadovoljavaju (7.4.3) nazivamo *skalarnim* operatorima. Najvažniji primer je sferno simetrični hamiltonijan.

Zadatak 7.4.1 Dati primer skalarnog operatora u Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}$ ovog odeljka.

Zadatak 7.4.2 Pokazati da su operatori

$$\hat{T}_{m=-1}^{(k=1)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{K}_-, \quad \hat{T}_{m=0}^{(k=1)} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_z, \quad \hat{T}_{m=1}^{(k=1)} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{K}_+ \tag{7.4.4a,b,c}$$

standardne komponente ireducibilnog tenzorskog operatora prvog reda.

7.4.2 Vektorski operatori

Iz Zadatka Z 7.4.2 vidimo da vektorski operator $\hat{\mathbf{K}}$ tek uz izvesnu modifikaciju zadovoljava (7.4.1a). Nameće se pitanje šta je to vektorski operator, pojam kojim smo se do sada mnogo koristili, a nismo ga definisali.

Kao i u klasičnoj fizici, *vektorski operator* se definiše po uzoru na operator radijus vektora $\hat{\mathbf{r}}$ u $\mathcal{H}_o$. Preciznije, vektorski operator $\hat{\mathbf{A}}$ u proizvoljnom Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}$ sa definisanim $\hat{\mathbf{K}}$ i $\{\hat{U}(\phi\mathbf{u})|\phi\mathbf{u}$ iz π-lopte$\}$ reliran je sa rotacijama (ili ekvivalentno sa $\hat{\mathbf{K}}$) istim relacijama kao $\hat{\mathbf{r}}$ u $\mathcal{H}_o$ sa $\{\hat{U}_0(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{l}}}|\phi\mathbf{u}$ iz π-lopte$\}$ (ili ekvivalentno sa $\hat{\mathbf{l}}$).

Prepišimo relacije (6.7.8) i (ekvivalentne relacije) (6.2.5), koje važe u $\mathcal{H}_o$:

$$\hat{U}_0(\phi\mathbf{u})\hat{\mathbf{r}}\hat{U}_0^{-1}(\phi\mathbf{u}) = R^{-1}(\phi\mathbf{u})\hat{\mathbf{r}}; \tag{7.4.5a}$$

$$[\ \hat{l}_q, \hat{q}'\ ] = \imath\hbar\sum_{q''=x,y,z}\epsilon_{qq'q''}\hat{q}'',\ \ q,q'=x,y,z, \tag{7.4.5b}$$

gde, kao i obično, matrica $R(\phi\mathbf{u})$ reprezentuje u fiksiranom Descartes-ovom koordinatnom sistemu $\{x_0, y_0, z_0\}$ rotaciju $R_{\phi\mathbf{u}}$ (koja deluje u objektivnom prostoru).

Dakle, vektorski operator $\hat{\mathbf{A}}$ u $\mathcal{H}$ možemo da definišemo bilo kojom od sledeće dve ekvivalentne jednakosti[7.4.1]:

$$\hat{U}_0(\phi\mathbf{u})\hat{\mathbf{A}}\hat{U}_0^{-1}(\phi\mathbf{u}) = R^{-1}(\phi\mathbf{u})\hat{\mathbf{A}}; \tag{7.4.6a}$$

$$[\ \hat{K}_q, \hat{A}_{q'}\ ] = \imath\hbar \sum_{q''=x,y,z} \epsilon_{qq'q''}\hat{A}_{q''}, \quad q, q' = x, y, z \tag{7.4.6b}$$

(naravno, $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$ je rotacija u $\mathcal{H}$).

Pošto su matrice $R(\phi\mathbf{u})$ ortogonalne, tj. $R^{-1} = R^T$, (7.4.6a) možemo takođe napisati koristeći se transponovanom matricom od R:

$$\boxed{\hat{U}(\phi\mathbf{u})\hat{A}_q\hat{U}^{-1}(\phi\mathbf{u}) = \sum_{q'=x,y,z} R_{q'q}(\phi\mathbf{u})\hat{A}_{q'}, \quad q = x, y, z}. \tag{7.4.7}$$

Ako uporedimo (7.4.7) sa jednakostima reprezentovanja operatora rotacije $\hat{R}_{\phi\mathbf{u}}$ u Descartes-ovom sistemu $\{x_0, y_0, z_0\}$

$$\hat{R}_{\phi\mathbf{u}}\mathbf{q}_0 = \sum_{q'=x,y,z} R_{q'q}\mathbf{q}'_0, \quad \mathbf{q}_0 = \mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0, \tag{7.4.8}$$

vidimo da u (7.4.7) operatori $\hat{A}_q$ igraju istu ulogu kao ortovi $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0$ u (7.4.8). Zato se $\hat{A}_q$ ponekad nazivaju Descartes-ovim komponentama ireducibilnog tenzorskog operatora prvog reda, ali najčešće komponentama *vektorskog operatora.*

Pažljivi čitalac već nazire da se relacije (7.4.4) uopštavaju, tj. da možemo pisati

$$\hat{A}^{(1)}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A}_x - \imath\hat{A}_y), \quad \hat{A}^{(1)}_0 = \hat{A}_z, \quad \hat{A}^{(1)}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A}_x + \imath\hat{A}_y), \tag{7.4.9a}$$

ili matrično izraženo

$$\begin{pmatrix} \hat{A}^{(1)}_{-1} \\ \hat{A}^{(1)}_0 \\ \hat{A}^{(1)}_1 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \hat{A}_x \\ \hat{A}_y \\ \hat{A}_z \end{pmatrix}, \quad S \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\imath\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\imath\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \tag{7.4.9b,c}$$

pri čemu je $\hat{\mathbf{A}}$ proizvoljan vektorski operator, a $\{\hat{A}^{(1)}_m | m = -1, 0, 1\}$ ireducibilni tenzorski operator prvog reda. Unitarna matrica S je matrica razvijanja standardnih komponenata po Descartes-ovim.

Zadatak 7.4.3 Pokazati da su (7.4.9b), (7.4.7) i (7.4.1a) u skladu sa:

$$U^{(k=1)}(\phi\mathbf{u}) = S^* R(\phi\mathbf{u}) S^T, \quad \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}. \tag{7.4.10}$$

[7.4.1] Treba uočiti da u jednakostima kao što su (7.4.5a) i (7.4.6a) vektorski operator zamišljamo kao kolonu od tri operatora. Na levoj strani sa $\hat{U} \ldots \hat{U}^{-1}$ delujemo posebno na svaki element u koloni, a na desnoj strani imamo množenje kvadratne brojne matrice R^{-1} istom kolonom. Ovo je kompaktno napisan sistem od 3 operatorske jednakosti.

Kao što je već rečeno, vektorski operator $\hat{\mathbf{A}}$ može se ekvivalentno definisati pomoću $\hat{\mathbf{K}}$:

$$\boxed{[\,\hat{K}_q, \hat{A}_{q'}\,] = \imath\hbar \sum_{q''=x,y,z} \epsilon_{qq'q''} \hat{A}_{q''}, \quad q, q' = x, y, z}. \tag{7.4.11}$$

Iz (7.4.11) i (6.2.7) je očigledno da je sam $\hat{\mathbf{K}}$ vektorski operator.

Zadatak 7.4.4 Pod pretpostavkom da je već poznato da su (7.4.1*a*) i (7.4.2) ekvivalentni (a to će biti dokazano u § 7.4.6), dokazati ekvivalentnost (7.4.7) i (7.4.11).

Zadatak 7.4.5 Nabrojati vektorske operatore kojima smo se do sada koristili i pokazati da je svaki od njih stvarno vektorski operator.

Na kraju ovog paragrafa, da ukažemo na *fizički smisao* transformacionih osobina vektorskih operatora. Neka je $\hat{\mathbf{A}}$ vektorska opservabla, a $|\,\psi\,\rangle$ proizvoljno stanje. Onda je očekivana vrednost $\langle\psi\mid\hat{\mathbf{A}}\mid\psi\,\rangle$ brojni vektor, tj. trojka brojeva koju dobijamo merenjem na ansamblu. Merne aparature su po pravilu klasične, a rezultati, kao $\langle\psi\mid\hat{\mathbf{A}}\mid\psi\,\rangle$, moraju imati klasične transformacione osobine (u ovom slučaju pod rotacijama). Ako primenimo rotacije u $\mathcal{H}$, na primer u Schrödinger-ovoj verziji (uporediti § 5.2.4), onda klasična rotacija R_ϕ, rezultuje u novom vektoru: $\langle\psi\mid\hat{U}^\dagger(\phi)\hat{A}_q\hat{U}(\phi)\mid\psi\,\rangle = \sum_{q'=x,y,z} R_{qq'}(\phi)\langle\psi\mid\hat{A}_{q'}\mid\psi\rangle$ ($\hat{U}^\dagger\ldots\hat{U}$ je inverzno od $\hat{U}\ldots\hat{U}^\dagger$, stoga $R_{qq'}$). Dakle, $\langle\psi\mid\hat{\mathbf{A}}\mid\psi\,\rangle$ se trasformiše kao klasični vektor.

7.4.3 $j - j$ i $L - S$ sprezanje

Počećemo paragraf sa dve korisne leme o vektorskim operatorima.

Lema 7.4.1 *Svaka linearna kombinacija vektorskih operatora je takođe vektorski operator.*

Zadatak 7.4.6 Dokazati Lemu L 7.4.1

.

Lema 7.4.2 *Tri operatora $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ i $\hat{l}_z$ orbitnog uglovnog momenta čestice koja ima spin čine vektorski operator ne samo u odnosu na orbitne rotacije, nego i u odnosu na ukupne (tj. orbitno-spinske) rotacije. Analogno važi za $\hat{\mathbf{s}}$.*

Dokaz: Pošto se čitalac već ubedio da je $\hat{\mathbf{l}}$ vektorski operator u $\mathcal{H}_o$, pređimo na ukupni prostor stanja $\mathcal{H}_u \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$. Leva strana od (7.4.7) onda glasi $(\hat{U}_0(\phi\mathbf{u}) \otimes \hat{U}_s(\phi\mathbf{u}))(\hat{l}_q \otimes \hat{I}_s)(\hat{U}_0^{-1}(\phi\mathbf{u}) \otimes \hat{U}_s^{-1}(\phi\mathbf{u}))$, što se svodi na $(\hat{U}_0(\phi\mathbf{u})\hat{l}_q\hat{U}_0^{-1}(\phi\mathbf{u})) \otimes (\hat{U}_s(\phi\mathbf{u})\hat{I}_s\hat{U}_s^{-1}(\phi\mathbf{u}))$. Pošto u $\mathcal{H}_o$ $\hat{\mathbf{l}}$ zadovoljava (7.4.7), prvi faktor je $\sum_{q'=x,y,z} R_{q'q}\hat{l}_{q'}$, te usled linearnosti direktnog proizvoda naša polazna leva strana postaje $\sum_{q'=x,y,z} R_{q'q}(\phi\mathbf{u})(\hat{l}_{q'} \otimes \hat{I}_s)$, tj. (7.4.7) važi i u $\mathcal{H}_u$. Za $\hat{\mathbf{s}}$ je dokaz analogan. *Q. E. D.*

Sada ćemo rezultat Leme L 7.4.2 uopštiti na sistem od više čestica sa spinom, na primer na atomski omotač od Z elektrona. Ukupni prostor stanja omotača glasi

$$\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots Z} = \mathcal{H}^{(u)}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(u)}_Z, \tag{7.4.12}$$

gde su faktor prostori ukupni prostori stanja pojedinih elektrona. Pošto je $\mathcal{H}^{(u)}_i = \mathcal{H}^{(o)}_i \otimes \mathcal{H}^{(s)}_i$, $i = 1, \ldots, Z$, imamo

$$\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots Z} = \mathcal{H}^{(o)}_1 \otimes \mathcal{H}^{(s)}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(o)}_Z \otimes \mathcal{H}^{(s)}_Z. \tag{7.4.13}$$

Pošto su fizičke rotacije uvek rotacije u ukupnom prostoru, postavlja se pitanje da li su na primer $\hat{\mathbf{l}}_1$ i $\hat{\mathbf{s}}_1$ vektori i u odnosu na ukupne rotacije. U ukupnom prostoru $\mathcal{H}^{(u)}_{1\dots Z}$ operator $\hat{\mathbf{l}}_1$ deluje kao $\hat{\mathbf{l}}_1 \otimes \hat{I}^{(s)}_1 \otimes \ldots \otimes \hat{I}^{(o)}_Z \otimes \hat{I}^{(s)}_Z$, stoga rezonovanjem kao u dokazu Leme L 7.4.2 lako možemo zaključiti da $\hat{\mathbf{l}}_1$ jeste vektor i u odnosu na ukupne rotacije ili ukupni uglovni moment $\hat{\mathbf{J}}$. Analogno važi za $\hat{\mathbf{s}}_1$, kao i za $\hat{\mathbf{l}}_i$, $\hat{\mathbf{s}}_i$, $i = 2, \ldots, Z$.

Poredak faktora kao u (7.4.12) i (7.4.13) prilagođen je tzv. $j - j$ *sprezanju* (engleski: *j-j coupling*, čitati: džej-džej kapling), tj. u svakom $\mathcal{H}^{(u)}_i$ imamo sprezanje $\hat{\mathbf{j}}_i = \hat{\mathbf{l}}_i + \hat{\mathbf{s}}_i$, a zatim $\hat{\mathbf{J}} = \sum_{i=1}^{Z} \hat{\mathbf{j}}_i$.

Postoji i druga mogućnost, tzv. $L - S$ *sprezanje*, koje se u atomskoj fizici naziva i Russel-Saunders-ovim (čitati: Rasl-Saunders) sprezanjem. Naime, na osnovu komutiranja faktor prostora (mada za jednu primenu poredak mora biti fiksiran, ali nakon permutovanja faktora dobijamo ekvivalentne rezultate), možemo ukupan prostor pisati u vidu

$$\mathcal{H}^{(o)}_{1\dots Z} = \mathcal{H}^{(o)}_{1\dots Z} \otimes \mathcal{H}^{(s)}_{1\dots Z}, \tag{7.4.14}$$

$$\mathcal{H}^{(o)}_{1\dots Z} = \mathcal{H}^{(o)}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(o)}_Z; \quad \mathcal{H}^{(s)}_{1\dots Z} = \mathcal{H}^{(s)}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(s)}_Z. \tag{7.4.15a,b}$$

Poretku faktor prostora kao u (7.4.15) i (7.4.14) odgovara sprezanje $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, gde su $\hat{\mathbf{L}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{Z} \hat{\mathbf{l}}_i$ i $\hat{\mathbf{S}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{Z} \hat{\mathbf{s}}_i$, *ukupni orbitni* odnosno *ukupni spinski* vektor uglovnog momenta omotača (realizacija za $\hat{\mathbf{K}}$ u $\mathcal{H}^{(o)}_{1\dots Z}$ odnosno u $\mathcal{H}^{(s)}_{1\dots Z}$).

Rezonovanjem kao u dokazu Leme L 7.4.2 sledi da su $\hat{\mathbf{L}}$ i $\hat{\mathbf{S}}$ vektorski operatori i u odnosu na $\hat{\mathbf{J}}$ (sveukupni uglovni moment), tj. u odnosu na fizičke rotacije.

7.4.4 Wigner-Eckart-ov teorem

Vratimo se opštem slučaju sa standardnim komponentama ireducibilnih tenzorskih operatora definisanih sa (7.4.1a). Mi još ne znamo šta je svrha ovih operatora.

U kvantnoj mehanici se veoma često moraju izračunati matrični elementi, tj. izrazi tipa $\langle \psi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle$, gde je $\hat{A}$ najčešće član u hamiltonijanu (na primer perturbacija). Možemo u prostoru stanja uvesti standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}}$ i razviti vektore stanja $\mid \psi \rangle$ i $\mid \phi \rangle$ po njemu. Standardan bazis u operatorskom prostoru se sastoji upravo od multipleta operatora definisanih sa (7.4.1a) i po njima možemo da razvijemo i $\hat{A}$. Na taj način se izračunavanje pomenutih matričnih elemenata svodi na izračunavanje matričnih elemenata vida $\langle km\lambda \mid \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle$. Za njih važi sledeće pojednostavljenje.

Teorem 7.4.1 (Wigner-Eckart-ov) *(Vigner, Ekart)*

$$\boxed{\langle km\lambda \mid \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle = (k_1 k_2 m_1 m_2 | km) \langle\, k\lambda \| \hat{T}^{(k_2)} \| k_1 \lambda_1 \,\rangle}, \tag{7.4.16}$$

gde je $\langle\, k\lambda \| \hat{T}^{(k_2)} \| k_1 \lambda_1 \,\rangle$, *tzv.* redukovani matrični element[7.4.2], *nepoznata funkcija od kvantnih brojeva* $k, \lambda, k_2, k_1, \lambda_1$, *čija funkcionalna zavisnost zavisi od prirode operatora* $\hat{T}^{(k_2)}_{m_2}$, *a prvi faktor na desnoj strani je CG-koeficijent.*

[7.4.2] Kod mnogih autora je redukovani matrični element definisan tako da se na desnoj strani (7.4.16) javlja faktor $\frac{1}{2k+1}$.

***Napomena* 7.4.1** *Pojednostavljenje u (7.4.1) sastoji se u tome što je sva zavisnost leve strane od magnetnih kvantnih brojeva m, m_1 i m_2 poznata preko CG-koeficijenta na desnoj strani. Nepoznati redukovani matrični element (koji u stvari nije matrični element, samo je uobičajeno da se simbolično ili uslovno tako piše i naziva) izračunava se tako da se za neku kombinaciju m, m_1 i m_2 za koju CG-koeficijent nije nula izračuna leva strana. Onda CG-koeficijenti odmah omogućavaju izračunavanje vrednosti leve strane za sve ostale kombinacije vrednosti m, m_1, m_2.*

***Napomena* 7.4.2** *Najveća korist od Wigner-Eckart-ovog teorema je u selekcionim pravilima koje u sebi nose CG-koeficijenti:*

$$\langle km\lambda \mid \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle = 0 \tag{7.4.17}$$

kadgod $m \neq m_1 + m_2$ i/ili kadgod k, k_1 i k_2 ne zadovoljavaju pravilo trougla.

Radi uprošćavanja računa, redukovani matrični element $\langle k\lambda \mid |\hat{T}^{(k_2)}| \mid k_1\lambda_1 \rangle$ stavljamo po definiciji jednakim nuli kad god je narušeno selekciono pravilo za k, k_1 i k_2 (jer onda ionako nemamo potrebe za njima).

Zadatak 7.4.7 Navesti eksplicitno selekciona pravila za skalarni i vektorski operator.

Zadatak 7.4.8 Pokazati da je matrični element $\langle k\alpha \mid |\hat{T}^{(k_2)}| \mid k_1\beta\rangle$ jednak nuli kad god k, k_1 i k_2 ne zadovoljavaju pravilo trougla. Ovde su vektori takvi da zadovoljavaju $\hat{\mathbf{K}}^2 \mid k\alpha\alpha\rangle = k(k+1)\hbar^2 \mid k\alpha\rangle$, $\hat{\mathbf{K}}^2 \mid k_1\beta\rangle = k_1(k_1+1) \mid k_1\beta\rangle$ (α i β su dodatni kvantni brojevi); $\hat{T}^{(k_2)} = \sum_{m_2=-k_2}^{k_2} \lambda_{m_2}\hat{T}^{(k_2)}_{m_2}$, gde su λ_{m_2} proizvoljni kompleksni brojevi, a $\hat{T}^{(k_2)}_{m_2}$ su standardne komponente nekog ireducibilnog tenzorskog operatora.

Nekad se u kontekstu matričnog elementa kao što je dat u Zadatku Z 7.4.8 kaže da vektori „nose" kvantne brojeve k odnosno k_1, a operator da „nosi" kvantni broj k_2.

Specijalni slučaj operatora $\hat{T}^{(k_2)}$ iz Zadatka Z 7.4.8 su komponente bilo kog vektorskog operatora.

Posle nekoliko pomoćnih rezultata primenićemo u sledećem paragrafu Wigner-Eckart-ov teorem na Zeeman-ov efekt atomskog omotača.

Lema 7.4.3 *Neka su $\hat{\mathbf{A}}$ i $\hat{\mathbf{B}}$ dva proizvoljna vektorska operatora. Njihov tzv. skalarni proizvod, tj. izraz*

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{B}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}_x\hat{B}_x + \hat{A}_y\hat{B}_y + \hat{A}_z\hat{B}_z, \tag{7.4.18}$$

je skalarni operator.

Zadatak 7.4.9 Dokazati Lemu L 7.4.3 na dva načina, jedan od njih da bude pomoću matrica, tj. pišući $\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{B}}$ kao vrstu od tri operatora množenu (matrično) sa kolonom od tri operatora.

Zadatak 7.4.10 a) Objasniti zašto *brojni vektor* (kao na primer $\boldsymbol{\phi}$ iz π-lopte) *nije vektorski operator.*

b) Pokazati da kad bi brojni vektori bili vektorski operatori, onda bi zbog Leme L 7.4.3 grupa rotacija morala biti komutativna.

***Napomena* 7.4.3** *Kao što proizlazi iz iskaza Zadatka Z 7.4.10a* potpuni efekt rotacije R_ϕ *u* $\mathcal{H}$ *u Heisenberg-ovoj verziji (bez obzira da li se radi o aktivnoj ili o pasivnoj interpretaciji) nije samo u tome da se svaki vektorski operator $\hat{\mathbf{A}}$ zameni rotiranim vektorskim operatorom $\hat{U}^{-1}(\phi)\hat{\mathbf{A}}\hat{U}(\phi)$ (i analogno svaki ireducibilni tenzorski operator itd.), već da se istovremeno svaki brojni vektor $\boldsymbol{\alpha}$ zameni sa $R(\phi)\boldsymbol{\alpha}$.*

Zadatak 7.4.11 Pokazati kako iz Napomene N 7.4.3 sledi invarijantnost izraza $\hat{\mathbf{A}} \cdot \boldsymbol{\alpha}$ pod potpunim efektom proizvoljne rotacije.

Zadatak 7.4.12 Realan broj α je specijalan slučaj hermitskog operatora i može da se fizički interpretira kao opservabla čije merenje sigurno daje rezultat α. Objasniti (u kontekstu Napomene N 7.4.3 i diskusije na kraju, paragrafa § 7.4.2) zašto brojni vektor $\boldsymbol{\alpha}$ ne može da se interpretira fizički kao vektorska opservabla. Navesti primere brojnih vektora u kvantnoj mehanici i ilustrovati iskaz da oni ne izražavaju (kvantizirane) varijable, već određuju vektore u običnom prostoru.

7.4.5 *Zeeman-ov efekt atomskog omotača

Sada ćemo nastaviti kvantno-mehaničko opisivanje efekta Zeeman-a, koje smo započeli u odeljku § 6.8 i nastavili u § 6.9.3.

Kvantizacijom klasičnog hamiltonijana koji opisuje omotač u prisustvu spoljašnjeg konstantnog i homogenog magnetnog polja $\mathbf{B}$ dobili smo (6.8.9). Prepisujemo ga u vidu

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{Z} (\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i}) + \sum_{i<j}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i=1}^{Z} \hat{\boldsymbol{\mu}}_i^{(l)} \cdot \mathbf{B}, \tag{7.4.19}$$

gde je $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i^{(l)} \stackrel{\text{def}}{=} -\mu_B g_l \hat{\mathbf{l}}_i$ (izostavili smo mali poslednji član koji je irelevantan za Zeeman-ov efekt).

S druge strane, pošto smo uveli spin (videti hipotezu spina u § 6.9.4) znamo da i unutrašnji magnetni dipolni moment $\hat{\boldsymbol{\mu}}_B = -g_s \mu_B \hat{\mathbf{s}}$ interaguje sa $\mathbf{B}$, tako da se u hamiltonijanu omotača mora pojaviti dodatni član $-\sum_{i=1}^{Z} \hat{\boldsymbol{\mu}}_i^{(s)} \cdot \mathbf{B}$, koji je nov u odnosu na kvantiziranu klasičnu jednačinu (7.4.19). Uključujući ovaj član u (7.4.19) i definišući $\hat{H}$ u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_Z) \otimes \mathcal{H}_{1\ldots Z}^{(s)}$, dolazimo do

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{Z} (\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i}) + \sum_{i<j}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}, \tag{7.4.20a}$$

gde je $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ vektorski operator magnetnog dipolnog momenta elektronskog omotača, a on glasi

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} \stackrel{\text{def}}{=} -\mu_B (g_l \hat{\mathbf{L}} + g_s \hat{\mathbf{S}}), \quad \hat{\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^{Z} \hat{\mathbf{l}}_i, \quad \hat{\mathbf{S}} = \sum_{i=1}^{Z} \hat{\mathbf{s}}_i. \tag{7.4.20b,c,d}$$

Giromagnetski ili Lande-ovi faktori g_l i g_s (orbitni i spinski) jednog elektrona imaju empirijske vrednosti:

$$g_l = 1, \quad g_s = 2 \tag{7.4.21a,b}$$

(to su približne vrednosti), a to daje i Dirac-ova relativistička kvantna teorija elektrona; često se g_l izostavlja (kao faktor), a umesto g_s odmah stavlja 2.

Kao što ćemo videti u § 9.1.10, činjenica da elektron ima spin ispoljava se ne samo kroz poslednji sabirak u (7.4.20b), nego i kroz još jedan sabirak u hamiltonijanu, $\hat{H}_{sl}$, koji predstavlja tzv. spin-orbitno sprezanje. Stoga, hamiltonijan omotača je

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{i=1}^{Z} (\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i}) + \sum_{i<j}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^{Z} \frac{1}{2m_e^2 c^2} \hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{l}}_i \frac{1}{r_i} \frac{\mathrm{d}V(r_i)}{\mathrm{d}r_i} - \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}} \tag{7.4.22}$$

(uporediti (9.1.37)).

Kada je magnetno polje toliko jako da $\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}}$ dominira nad $\hat{H}_{sl}$ (tj. nad pretposlednjim sabirkom), onda se govori o *Paschen-Back-ovom* efektu (čitati: Pašen-Bak). U obratnom slučaju, kada je $\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}}$ za redove veličine manji od $\hat{H}_{sl}$, imamo *Zeeman-ov efekt.*

Zadatak 7.4.13 a) Pokazati da je $\hat{H}$ iz (7.4.22) bez poslednjeg sabirka rotaciono simetričan i da se potpuna klasifikacija stanja postiže standardnim bazisom $\{\mid JM_J\lambda\,\rangle|\forall J, M_J,\lambda\}$ za $\hat{\mathbf{J}}$ (ovde λ uključuje kvantni broj energetskog nivoa).

b) Pokazati da se odbacivanjem poslednjeg i pretposlednjeg sabirka u (7.4.22) (nulta aproksimacija u Paschen-Back-ovom efektu) potpuna klasifikacija stanja postiže i bazisom $\{\mid LM_LSM_S\lambda\,\rangle|\forall L, M_L, S, M_S,\lambda\}$, koji je standardan bazis za $\hat{\mathbf{L}}$ i $\hat{\mathbf{S}}$.

Rezultati merenja Zeeman-ovog efekta mogu da se teorijski reprodukuju sa zadovoljavajućom tačnošću ako član $-\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}}$ u (7.4.22) tretiramo kao *perturbaciju* i to *u prvoj aproksimaciji.*

Sada moramo malo anticipirati rezultate kasnijih glava. Kao što ćemo videti kad budemo izučavali teoriju stacionarnih perturbacija degenerisanog nivoa (§ 10.2.2), da bismo izračunali kakvo će cepanje jednog neperturbisanog nivoa $E_{\bar{n}}$ izazvati perturbacija u prvoj aproksimaciji, moramo dijagonalizirati samo jednu podmatricu operatora perturbacije u energetskoj reprezentaciji neperturbisanog hamiltonijana. Ta se podmatrica sastoji od svih matričnih elemenata koji, kao što se kaže, povezuju vektore stanja koji odgovaraju dotičnom fiksiranom nivou $E_{\bar{n}}$. Pošto nivoi E_n neperturbisanog hamiltonijana funkcionalno zavise od kvantnih brojeva n, J, M_J, λ (uporediti Zadatak Z 7.4.12.a., sad λ ne uključuje n), zajedno sa nivoom $E^0_{\bar{n}}$ fiksirani su i odgovarajući kvantni brojevi $\bar{n}$, J_0, λ_0, tj. svi osim M_J. Degenerisanost nivoa je $2J_0+1$ i podmatrica reda $(2J_0+1)\times(2J_0+1)$ od operatora perturbacije $-\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}}$ (vrste i kolone prebrojava M_{J_0}) dijagonalizacijom daje pomenuto cepanje.

Dakle, potrebni su nam matrični elementi $\langle\bar{n}J_0M_{J_0}\lambda_0\mid(-\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}})\mid\bar{n}J_0M'_{J_0}\lambda_0\,\rangle$. Međutim, na osnovu (7.4.20) niže i eksplicitne forme operatora $-\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}}$ (uporediti (7.4.20*b*) i (7.4.21)), pišemo

$$\langle\bar{n}J_0M_{J_0}\lambda_0\mid(\hat{\mathbf{L}}+2\hat{\mathbf{S}})\mid\bar{n}J_0M'_{J_0}\lambda_0\,\rangle = g\langle\bar{n}J_0M_{J_0}\lambda_0\mid\hat{\mathbf{J}}\mid\bar{n}J_0M'_{J_0}\lambda_0\,\rangle. \tag{7.4.23}$$

Faktor g naziva se giromagnetskim ili Lande-ovim faktorom elektronskog omotača. To je veličina koja karakteriše dotični nivo $E^0_{\bar{n}}$ (zavisi od $\bar{n}$, J_0 i λ_0, a ne od M_{J_0}).

Koristeći (7.4.23), dolazimo do sledećeg rezultata

$$\langle\bar{n}J_0M_{J_0}\lambda_0\mid(-\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}})\mid\bar{n}J_0M'_{J_0}\lambda_0\,\rangle = gB\mu_B\langle\bar{n}J_0M_{J_0}\lambda_0\mid\hat{J}_z\mid\bar{n}J_0M'_{J_0}\lambda_0\,\rangle$$

($z-$osa je duž $\mathbf{B}$; $B\overset{\mathrm{def}}{=}|\mathbf{B}|=B_z$, $B_x=B_y=0$), iz čega sledi

$$LS=\delta_{M_{J_0}M'_{J_0}}gB\mu_BM_{J_0}\hbar.$$

Dakle, zahvaljujući tome što smo pomoću Lande-ovog faktora g uspeli da svedemo sve relevantne operatore na $\hat{J}_z$ (a to smo mogli zahvaljujući Lemi (L 7.4.7) niže, a u stvari na osnovu Wigner-Eckart-ovog teorema), naša podmatrica je već dijagonalna, te perturbisani energetski nivoi (u prvoj približnosti) glase[7.4.3]

[7.4.3] Ponekad se uvodi tzv. magnetni moment elektronskog omotača i obeležava se sa m. To je po definiciji $m\overset{\mathrm{def}}{=}\langle\bar{n}J_0, M_{J_0}=J_0,\lambda_0\mid\hat{\boldsymbol{\mu}}_z\mid\bar{n}J_0, M_{J_0}=J_0,\lambda_0\,\rangle=-\mu_BJ_0\hbar g$ (videti (7.4.20*b*) i (7.4.23)). Očigledno, m igra analognu ulogu kao g i nema potrebe uvoditi obe ove veličine.

$$\boxed{E(\bar{n}\ J_0\ \lambda_0) = E^0_{\bar{n}} + g\ B\ \mu_B\ M_{J_0}\ \hbar}. \tag{7.4.24}$$

Nivo $E^0_{\bar{n}}$ cepa se na $2J_0 + 1$ ekvidistantnih nivoa, a „distanca" je $gB\mu_B\hbar$.

Opštu formulu (7.4.24) možemo primeniti i na slučaj jednog valentnog elektrona (izostavljajući popunjene ljuske i podljuske). Uzmimo dva primera, srebro (Ag) sa konfiguracijom (Kr)(5s)(4d)^{10} i uglovnim momentima $^2S_{\frac{1}{2}}$ i talijum (Tl) konfiguracije (Xe)(6s)^2(4f)^{14}(5d)^{10}(6p) i sa $^2P_{\frac{1}{2}}$. Pošto je u oba slučaja $J = j = \frac{1}{2}$, Zeeman-ov efekt cepa neperturbisani nivo osnovnog stanja na dva nivoa (anomalni Zeeman-ov efakt). Ali Tl usled $L = l = 1$ (za Ag: $L = l = 0$) ima manji g faktor i, kao što vidimo iz (7.4.24), razmak perturbisanih nivoa je manji.

Zadatak 7.4.14 Pokazati da se u slučaju Paschen-Back-ovog efekta obrazac (7.4.24) zamenjuje formulom

$$E(\bar{n}\ L_0\ S_0\ \lambda_0) = E^0_{\bar{n}} + \mu_B\ B\ (M_{L_0} + 2M_{S_0}). \tag{7.4.25}$$

7.4.6 *DODATAK 1 - Superoperatori rotacija i uglovnog momenta

Za ljubitelje dubljih matematičkih sagledavanja daćemo kratak prikaz ireducibilnih tenzorskih operatora sa gledišta superoperatora, tj. operatora koji deluju na operatore dajući opet operator (uporediti § 5.2.3).

Neka je $\mathcal{H}$ naš prostor stanja kvantnog sistema, a sa $\mathcal{H}^2$ obeležimo (kompleksni) linearni prostor svih linearnih operatora koji deluju u $\mathcal{H}$ i nazvaćemo ga superprostor[7.4.4]. Superoperatori su linearni oparatori u $\mathcal{H}^2$.

Pođimo od proučavanja superoperatora

$$\hat{\hat{U}}(\phi\mathbf{u})\hat{A} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}(\phi\mathbf{u})\hat{A}\hat{U}^{-1}(\phi\mathbf{u}), \quad \forall\hat{A} \in \mathcal{H}^2,\ \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}. \tag{7.4.26a}$$

Pošto operatori rotacije vektora u $\mathcal{H}$ (u Schrödinger-ovoj verziji) glase $\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\phi}\cdot\hat{\mathbf{K}}}$, imamo

$$\hat{\hat{U}}(\phi\mathbf{u})\hat{A} = e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\phi}\cdot\hat{\mathbf{K}}}\hat{A}e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\phi}\cdot\hat{\mathbf{K}}}. \tag{7.4.26b}$$

Uvedimo sad superoperatore

$$\hat{\hat{K}}_q\hat{A} \stackrel{\text{def}}{=} [\ \hat{K}_q, \hat{A}\ ], \quad \forall\hat{A} \in \mathcal{H}^2,\ q = x, y, z. \tag{7.4.27}$$

Na osnovu Baker-Hausdorff-ove leme (videti § 5.2.3) i (7.4.27), možemo (7.4.26b) prepisati kao

$$\boxed{\hat{\hat{U}}(\phi\mathbf{u})\hat{A} = e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\phi}\cdot\hat{\hat{K}}}\hat{A}} \tag{7.4.28}$$

(iskoristili smo linearnost komutatora po prvom faktoru).

Zadatak 7.4.15 Dokazati da je preslikavanje $\hat{U}(\phi\mathbf{u}) \to \hat{\hat{U}}(\phi\mathbf{u})$, zadato sa (7.4.26$a$), izomorfizam.

[7.4.4] Preciznije rečeno, u $\mathcal{H}^2$ spadaju samo linearni operatori čiji je domen gust u $\mathcal{H}$. Opštiji linearni operatori se ne susreću u kvantnoj mehanici.

Zbog (7.4.28) grupu superoperatora $\{\hat{\hat{U}}(\phi\mathbf{u})|\phi\mathbf{u}$ iz π-lopte$\}$ možemo interpretirati (formalno) kao *grupu superrotacija*[7.4.5] u $\mathcal{H}^2$. Generator je vektorski superoperator $\hat{\hat{\mathbf{K}}} \stackrel{\text{def}}{=} \{\hat{\hat{K}}_x, \hat{\hat{K}}_y, \hat{\hat{K}}_z\}$. Proverimo koje komutacione relacije zadovoljavaju komponente.

Iz Jacobi-evog identiteta za komutatore sledi $[\ \hat{K}_x, [\ \hat{K}_y, \hat{K}_z\ ]\ ] +$ cikl. perm. $= 0 \Rightarrow [\ \hat{K}_x, [\ \hat{K}_y, \hat{A}\ ]\ ] - [\ \hat{K}_y, [\ \hat{K}_x, \hat{A}\ ]\ ] - [\ [\ \hat{K}_x, \hat{K}_y\ ], \hat{A}\ ] = 0$, što na osnovu definicije (7.4.27) i relacije $[\ \hat{K}_x, \hat{K}_y\ ] = \imath\hbar\hat{K}_z$ dovodi do

$$\boxed{[\ \hat{\hat{K}}_x, \hat{\hat{K}}_y\ ] = \imath\hbar\hat{\hat{K}}_z \quad \text{i cikl. perm.}}, \tag{7.4.29}$$

jer $\hat{A} \in \mathcal{H}^2$ je proizvoljan operator. Ciklične permutacije slede analogno, kao i nultost ostalih komutatora.

Tek sada možemo s pravom govoriti o rotacijama u $\mathcal{H}^2$, a o $\hat{\hat{\mathbf{K}}}$ kao o vektorskom superoperatoru uglovnog momenta.

Što se tiče ireducibilnih tenzorskih operatora, prepišimo sad definiciju (7.4.1*a*) u vidu

$$\hat{\hat{U}}(\phi\mathbf{u})\hat{T}^{(k)}_m = \sum_{m'=-k}^{k} U^{(k)}_{m'm}(\phi\mathbf{u})\hat{T}^{(k)}_{m'}. \tag{7.4.30}$$

Kad (7.4.30) uporedimo sa (6.4.5) (videti i pasus ispod toga), dolazimo do zaključka da je ireducibilni tenzorski operator u stvari jedan *multiplet standardnog bazisa* za superrotacije.

Radi alternativnog definisanja ireducibilnog tenzorskog operatora, jednakosti (7.4.2) prepisujemo u vidu

$$\hat{\hat{K}}_z\hat{T}^{(k)}_m = m\hbar\hat{T}^{(k)}_m, \tag{7.4.31a}$$

$$\hat{\hat{K}}_\pm\hat{T}^{(k)}_m = \sqrt{k(k+1) - m(m\pm 1)}\,\hat{T}^{(k)}_{m\pm 1}. \tag{7.4.31b}$$

Upoređujući (7.4.31*a*) sa (6.2.21*c*), a (7.4.31*b*) sa (6.3.14*c*,6.3.14*d*) (videti i Zadatak 6.3.6 ispod toga), dolazimo do istog zaključka.

Čitaocu je već, bez sumnje, palo u oči da u superprostoru $\mathcal{H}^2$ ipak nešto nedostaje: nemamo unitarni skalarni proizvod i $\mathcal{H}^2$ nije Hilbert-ov prostor. Ipak, tzv. Hilbert-Schmidt-ovi operatori u $\mathcal{H}$, tj. linearni operatori za koje važi $\mathrm{Tr}\,\hat{A}^\dagger\hat{A} < \infty$ (ako je $\mathcal{H}$ konačno-dimenzionalan, onda su svi linearni operatori Hilbert-Schmidt-ovi), čine Hilbert-ov prostor $\mathcal{H}^2_{HS} \subseteq \mathcal{H}^2$. Skalarni proizvod je definisan u $\mathcal{H}^2_{HS}$ na sledeći način

$$(\ \hat{A}\ ,\ \hat{B}\ ) \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{Tr}\,\hat{A}^\dagger\hat{B}. \tag{7.4.32}$$

Zadatak 7.4.16 Pokazati da su superrotacije $\hat{\hat{U}}(\phi\mathbf{u})$ unitarni, a superoperatori uglovnog momenta $\hat{\hat{K}}_q$ hermitski u $\mathcal{H}^2_{HS}$.

[7.4.5] Ako fizički interpretiramo rotacije u $\mathcal{H}^2$, onda smo u Heisenberg-ovoj verziji i $\hat{\hat{U}}^{-1}(\phi\mathbf{u})$ odgovara rotaciji $R_{\phi\mathbf{u}}$ u objektivnom običnom prostoru. Ali zbog zahteva izomorfizma, mi smo onda u levom stupcu na C 5.2, imamo pasivnu interpretaciju i u stvari $R^{-1}_{\phi\mathbf{u}}$ deluje na koordinatni sistem. Tako da opet imamo $R_{\phi\mathbf{u}} \to \hat{\hat{U}}(\phi\mathbf{u})$ (izomorfno), gde rotacije $R_{\phi\mathbf{u}}$ deluju u skupu koordinatnih sistema (kvadrat I na C 5.2).

Dakle, u $\mathcal{H}^2_{HS}$ imamo jednu realizaciju opšte teorije uglovnog momenta i svi njeni rezultati se prenose i na ovaj slučaj. Na primer, što je za nas od važnosti, iz opšte teorije sledi da su relacije (7.4.30) i (7.4.31), tj. zapravo (7.4.1*a*) i (7.4.2*a*-7.4.2*c*), *ekvivalentne definicije*.

U kvantnoj mehanici obično susrećemo operatore koji nisu Hilbert-Schmidt-ovi. Stoga nam se nameće pitanje da li ekvivalentnost definicija (7.4.1*a*) i (7.4.2*a*-7.4.2*c*) važi i u slučaju kada nisu svih $2k+1$ standardnih komponenti ireducibilnog tenzorskog operatora Hilbert-Schmidt-ovi.

Potvrdan odgovor sledi iz činjenice da su rotacije $\{\hat{\hat{U}}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\hat{\hat{K}}}|\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte}\}$ s jedne strane i $\{\hat{\hat{K}}_z, \hat{\hat{K}}_\pm\}$ s druge uzajamno povezani funkcionalnim zavisnostima (uporediti (6.4.1)). Zahvaljujući tome, možemo poći od (7.4.30) i, pogodno se koristeći eksplicitnom formom U-funkcija, stići do (7.4.31*a*, 7.4.31*b*) i obratno. Pri tome nije bitno što nismo *a priori* sigurni da su $\{\hat{T}^{(k)}_m m = -k, \ldots, k\}$ kao vektori u $\mathcal{H}^2$ linearno nezavisni. Upravo zbog toga i ne moramo da činimo pomenute korake, jer u unitarnom prostoru, kada su vektori $\{|\, km\lambda\,\rangle | m = -k, \ldots, k\}$ ortonormirani, znamo da iz jednog sistema jednakosti sledi drugi i obratno.

Zadatak 7.4.17 Pokazati da (7.4.31*a*, 7.4.31*b*) impliciraju da su $\{\hat{T}^{(k)}_m | m = -k, \ldots, k\}$ ili svi nula ili linearno nezavisni. (Indikacija: Koristiti se sa (7.4.31*b*) za eliminaciju mogućnosti da neki od pomenutih operatora jesu, a drugi nisu nula. Iz (7.4.31*a*) *ab contrario* rezonovanjem sledi da nenultost dotičnih operatora implicira da su linearno nezavisni.)

7.4.7 *DODATAK 2 - Dokaz Wigner-Eckart-ovog teorema

Ovaj dokaz zasniva se na analogiji $(2k_1+1)(2k_2+1)$ vektora

$$\{\hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1\,\rangle | m_1 = -k_1, \ldots, k_1; m_2 = -k_2, \ldots, k_2\} \tag{7.4.33}$$

sa bazisom (7.2.1). Naime, uprkos tome što vektori u skupu (7.4.33) nisu nužno linearno nezavisni (čak nisu ni nužno različiti od nule), raspolažemo algoritmom po kome se likovi vektora iz (7.4.33) po operatorima rotacije jednoznačno razvijaju po (7.4.33):

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u})(\hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1\,\rangle) = (\hat{U}(\phi\mathbf{u})\hat{T}^{(k_2)}_{m_2}\hat{U}^{-1}(\phi\mathbf{u}))(\hat{U}(\phi\mathbf{u}) \mid k_1 m_1 \lambda_1\,\rangle) =$$
$$\sum_{m_1'=-k_1}^{k_1} \sum_{m_2'=-k_2}^{k_2} U^{(k_1)}_{m_1' m_1}(\phi\mathbf{u}) U^{(k_2)}_{m_2' m_2}(\phi\mathbf{u}) \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1' \lambda_1\,\rangle, \ \ \forall m_1,\ m_2. \tag{7.4.34}$$

Ako (7.4.33) napišemo u vidu supervektora, označićemo ga sa (33), onda se (7.4.34) može prepisati kao

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u})(33) = (\hat{U}^{(k_1)}(\phi\mathbf{u}) \otimes \hat{U}^{(k_2)}(\phi\mathbf{u}))^T(33), \tag{7.4.35}$$

što je analogno sa (7.2.14).

Prosledimo analogiju između (7.4.33) i bazisa (7.2.1) dalje.

Iz (7.2.18) sledi

$$(\hat{U}^{(k_1)}(\phi\mathbf{u}) \otimes \hat{U}^{(k_2)}(\phi\mathbf{u}))^T = M^{-1}(\oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \hat{U}^{(k)}(\phi\mathbf{u}))^T M. \tag{7.4.36}$$

Kada (7.4.36) zamenimo u (7.4.35) i pomnožimo s leva sa M (što komutira sa $\hat{U}(\phi\mathbf{u})$), dolazimo do jednakosti

$$\hat{U}(\phi\mathbf{u})M(33) = (\oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} U^{(k)T}(\phi\mathbf{u}))M(33) \tag{7.4.37}$$

(u direktnom zbiru matrica transponuje se svaki sabirak posebno, kao što se čitalac lako može uveriti).

Upoređujući (7.4.37) sa (7.2.15), vidimo da je $M(33)$ analogon standardnog bazisa (7.2.2).

Pošto znamo vektore u supervektoru (33) i znamo matrične elemente od M (videti (7.2.7a)), možemo napisati kako glase vektori u supervektoru $M(33)$. Obeležimo ove vektore (zasad uslovno) sa ψ_{km}. Onda

$$\psi_{km} = \sum_{m_1 m_2} (k_1 k_2 m_1 m_2 | km) \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle, \; k = |k_1 - k_2|, \ldots, k_1 + k_2; m = -k, \ldots, k. \quad (7.4.38)$$

Obeležimo supervektor koji se sastoji od vektora ψ_{km}, $m = -k, \ldots, k$, sa (ψ_k). (7.4.37) se očigledno raspada na sledeće manje supervektorske jednakosti

$$\hat{U}(\phi \mathbf{u})(\psi_k) = \hat{U}^{(k)T}(\phi \mathbf{u})(\psi_k), \;\; k = |k_1 - k_2|, \ldots, k_1 + k_2. \quad (7.4.39)$$

Sistem jednakosti (7.4.39) je analogan jednakostima (7.4.30) iz prethodnog Dodatka. Kao i tamo (kraj od § 7.4.6 i Zadatak Z 7.4.16), možemo zaključiti da se skupovi $\{\psi_{km} | m = -k, \ldots, k\}$ ili sastoje od samih nula ili od $2k+1$ linearno nezavisnih vektora. Proširenjem dokaza L 6.4.2 sa unitarnog operatora prelaska $\hat{W}$ na nesingularni (uopštavajući na bazise od linearno nezavisnih vektora), analogno sledi da vektori ψ_{km}, $m = -k, \ldots, k$, ako nisu svi nula, onda moraju biti jednaki vektorima iz jednog multipleta standardnog bazisa pomnoženim sa nekim zajedničkim brojnim faktorom.

Invertovanjem jednakosti (7.4.38) dolazimo do

$$\hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle = \sum_{k'm'} (k_1 k_2 m_1 m_2 | km) \psi_{km}. \quad (7.4.40)$$

množeći (7.4.40) s leva skalarno sa $\langle km\lambda \mid$, dobijamo

$$\langle km\lambda \mid \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle = \sum_{k'm'} (k_1 k_2 m_1 m_2 | km) \langle \, km\lambda \mid \psi_{k'm'} \rangle. \quad (7.4.41)$$

leva strana od (7.4.41) je leva strana od (7.4.16), tj. od Wigner-Eckart-ovog Teorema koji dokazujemo.

Pošto su ψ_{km} s tačnošću do zajedničke norme vektori standardnog bazisa, $\langle \, km\lambda \mid \psi_{km} \rangle = \delta_{k'k} \delta_{m'm} \langle \, km\lambda \mid \psi_{km} \rangle$ i suma u (7.4.41) svodi se na samo jedan član:

$$\langle km\lambda \mid \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle = (k_1 k_2 m_1 m_2 | km) \langle \, km\lambda \mid \psi_{km} \rangle. \quad (7.4.42)$$

Preostaje samo da ispitamo od čega zavisi izraz

$$\langle \, km\lambda \mid \psi_{km} \rangle = \sum_{m_1 m_2} (k_1 k_2 m_1 m_2 | km) \langle km\lambda \mid \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle.$$

Iz definicije standardnog bazisa (6.3.14d) sledi (kao što se lako vidi):

$$\mid km\lambda \rangle = \frac{\hat{K}_- \mid k, m+1, \lambda \rangle}{\hbar \sqrt{(k+m+1)(k-m)}} = \frac{\hat{K}_- \mid k, m+1, \lambda \rangle}{\hbar \sqrt{k(k+1) - m(m+1)}}, \; \forall m. \quad (7.4.43)$$

Ako stavimo $|\,\psi_{km}\rangle = c\,|\,km\tau\,\rangle$ (izbor τ je potpuno nezavisan od izbora λ u fiokama ormara sa fiokama), za $|\,km\tau\,\rangle$ važi (7.4.43) *mutatis mutandis*. Onda $\langle\, km\lambda \mid \psi_{km}\rangle = \frac{c}{\hbar^2}\frac{\langle k,m+1,\lambda|\hat{K}_+\hat{K}_-|k,m+1,\tau\,\rangle}{k(k+1)-m(m+1)}$. Pošto je po (6.2.20) $\hat{K}_+\hat{K}_- = \hat{\mathbf{K}}^2 - \hat{K}_z(\hat{K}_z-\hbar)$, to se u našem slučaju $\hat{K}_+\hat{K}_-$ svodi na $k(k+1)\hbar^2-(m+1)\hbar m\hbar$ i imamo

$$\langle\, km\lambda \mid \psi_{km}\rangle = \langle\, k,m+1,\lambda \mid \psi_{k,m+1}\rangle,\quad \forall m. \tag{7.4.44}$$

Iz (7.4.44) vidimo da izraz $\langle\, km\lambda \mid \psi_{km}\rangle$ ne zavisi od m. Znači, zavisi samo od kvantnih brojeva k, λ, k_2, k_1, λ_1 kao i od same prirode operatorâ $\hat{T}^{(k_2)}_{m_2}$. Po konvenciji ga pišemo kao redukovani matrični element $\langle\, km\lambda \mid \psi_{km}\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle k\lambda \mid |T^{(k_2)}| \mid k_1\lambda_1\,\rangle$. Q.E.D.

7.4.8 *DODATAK 3: Pomoćni rezultati za primenu Wigner-Eckart-ovog teorema

Najvažnija je primena Wigner-Eckart-ovog Teorema na vektorske operatore. Radi nje dokazaćemo neke pomoćne rezultate.

Zadatak 7.4.18 Pokazati da iz samog pojma CG-koeficijenata i iz konvencije (7.2.3) sledi

$$(k_1,k_2=0,m_1,m_2=0|km) = \delta_{k_1k}\delta_{m_1m}, \tag{7.4.45a}$$

$$(k_1=0,k_2,m_1=0,m_2|km) = \delta_{k_2k}\delta_{m_2m}. \tag{7.4.45b}$$

Lema 7.4.4 *Za skalarni operator $\hat{T}=\hat{T}^{(k_2)}_{m_2=0}$ važi formula*

$$\langle km\lambda \mid \hat{T} \mid k_1m_1\lambda_1\,\rangle = \delta_{kk_1}\delta_{mm_1}\langle\, k\lambda\|T\|k\lambda_1\,\rangle, \tag{7.4.46}$$

tj. matrični elementi u standardnom bazisu su dijagonalni po k i m (ne nužno i po λ), a nenulti elementi se svode na redukovani matrični element.

Dokaz: (7.4.46) je neposredna posledica Wigner-Eckart-ovog Teorema (7.4.16) i relacije (7.4.45a). *Q. E. D.*

Zadatak 7.4.19 Na osnovu opšte formule (7.2.9) za CG-koeficijente pokazati da važi

$$(k_1k0|kk) = \sqrt{k(k+1)},\quad \forall k. \tag{7.4.47}$$

Lema 7.4.5 *Redukovani matrični element od $\hat{\mathbf{K}}$ u standardnom bazisu za $\hat{\mathbf{K}}$ glasi*

$$\langle\, k\lambda\|K\|k_1\lambda_1\,\rangle = \delta_{kk_1}\delta_{\lambda\lambda_1}\sqrt{k(k+1)}\hbar,\quad \forall k,\lambda,k_1,\lambda_1. \tag{7.4.48}$$

Dokaz: Na osnovu formule razvoja (7.4.9b) i zatim Wigner-Eckart-ovog Teorema (7.4.16), možemo pisati:

$$\langle km\lambda \mid \hat{K}_q \mid k_1m_1\lambda_1\,\rangle = \sum_{m_2=-1}^{1} S^\dagger_{qm_2}\langle km\lambda \mid \hat{K}^{(k_2=1)}_{m_2} \mid k_1m_1\lambda_1\,\rangle = \sum_{m_2} S^*_{m_2q}\langle\, k\lambda\|K\|k_1\lambda_1\,\rangle(K_11m_1m_2|km),\quad q=x,y,z.$$

Zbog ovog lakog svođenja vektorskog operatora na standardne komponente, izraz $\langle\, k\lambda\|K\|k_1\lambda_1\,\rangle$ nazivamo i redukovanim matričnim elementom vektorskog operatora.

Stavimo sad $q=z$ i $m_1=k_1$ u dobijenoj jednakosti. Imajući u vidu da $\hat{K}_z=\hat{K}^{(k_2=1)}_0$ i $S_{m_2,q=z}=\delta_{m_2,0}$, $\forall m_2$ uporediti (7.4.9c), onda ova jednakost daje $k_1\hbar\delta_{kk_1}\delta_{mk_1}\delta_{\lambda\lambda_1} = \langle\, k\lambda\|K\|k_1\lambda_1\,\rangle(k_11k_10|km)$ (na levoj strani smo iskoristili da se radi o standardnom bazisu za $\hat{\mathbf{K}}$). Dakle, deleći sa CG-koeficijentom za vrednosti kvantnih brojeva za koje nije nula, i koristeći se sa (7.4.47) zbog δ_{kk_1} na levoj strani, dolazimo do

$$\langle\, k\lambda\|K\|k_1\lambda_1\,\rangle = \delta_{kk_1}\delta_{\lambda\lambda_1}[k(k+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar.$$

Već smo bili definisali da LS=0 ako k, 1 i k_1 ne zadovoljavaju pravilo trougla. *Q. E. D.*

Lema 7.4.6 *Neka je* $\{\hat{T}^{(k_2=1)}_{m_2}|m_2 = -1, 0, 1\}$ *proizvoljni ireducibilan tenzorski operator prvog reda. Njegovi matrični elementi u standardnom bazisu za* $\hat{\mathbf{K}}$*, koji su dijagonalni po* λ *i* k *(ne nužno i po* m*), proporcionalni su odgovarajućim matričnim elementima od* $\{\hat{K}^{(k_2=1)}_{m_2}|m_2 = -1, 0, +1\}$*, tj. od standardnih komponenti od* $\hat{\mathbf{K}}$*:*

$$\langle km\lambda \mid \hat{T}^{(k_2=1)}_{m_2} \mid km_1\lambda\,\rangle = \alpha(k\lambda)\langle km\lambda \mid \hat{K}^{(k_2=1)}_{m_2} \mid km_1\lambda\,\rangle, \quad \forall\lambda, k, m, m_1, \tag{7.4.49}$$

a faktor proporcionalnosti $\alpha(k\lambda)$ *zavisi od* k*,* λ *i od prirode operatora* $\hat{T}^{(k_2=1)}_{m_2}$ *(a ne i od magnetnih kvantnih brojeva).*

Dokaz: $\langle km\lambda \mid \hat{T}^{(k_2=1)}_{m_2} \mid km_1\lambda\,\rangle = \langle\, k\lambda\|T\|k\lambda\,\rangle(k1m_1m_2|km)$ po Wigner-Eckart-ovom Teoremu. Ako je $k > 0$, onda $1 = \frac{\langle\, k\lambda\|K\|k\lambda\,\rangle}{\langle\, k\lambda\|K\|k\lambda\,\rangle}$ (imenitelj nije nula na osnovu (7.4.48)) i ovo možemo da ubacimo na desnu stranu. Još jedanput se koristeći Wigner-Eckart-ovim Teoremom tako se dolazi do jednakosti

$$\langle km\lambda \mid \hat{T}^{(k_2=1)}_{m_2} \mid km_1\lambda\,\rangle = \frac{\langle\, k\lambda\|T\|k\lambda\,\rangle}{\langle\, k\lambda\|K\|k\lambda\,\rangle}\langle km\lambda \mid \hat{K}^{(k_2=1)}_{m_2} \mid km_1\lambda\,\rangle.$$

Naravno, $\alpha(k\lambda)$ je izraz u srednjoj zagradi.

Jednakost (7.4.49) važi i za $k = 0$, jer onda je narušeno selektivno pravilo trougla i LS=DS=0. *Q. E. D.*

Lema 7.4.7 *U standardnom bazisu za* $\hat{\mathbf{K}}$ *matrični elementi proizvoljnog vektorskog operatora* $\hat{\mathbf{T}}$ *koji su dijagonalni po* λ *i* k *(ne nužno i po* m*) su proporcionalni sa odgovarajućim matričnim elementima od* $\hat{\mathbf{K}}$*. Faktor proporcionalnosti,* $\alpha(k\lambda)$*, je isti kao u prethodnoj Lemi. Dakle,*

$$\boxed{\langle km\lambda \mid \hat{\mathbf{T}} \mid km_1\lambda\,\rangle = \alpha(k\lambda)\langle km\lambda \mid \hat{\mathbf{K}} \mid km_1\lambda\,\rangle, \ \ \forall k, \lambda, m, m_1}. \tag{7.4.50}$$

Dokaz: Odmah sledi ako od razvoja $\hat{T}_q = \sum_{m_2=-1}^{1} S^{\dagger}_{qm_2}\hat{T}^{(k_2=1)}_{m_2}$, $q = x, y, z$ (uporediti dokaz Leme L 7.4.5) uzmemo matrični element $\langle km\lambda \mid \ldots \mid km_1\lambda_1\,\rangle$ i ako iskoristimo (7.4.49). *Q. E. D.*

7.5 Superselekciono pravilo celobrojnosti uglovnog momenta

U ovom odeljku proučićemo jednu važnu osobinu kvantno mehaničkog uglovnog momenta. Formulisaćemo je kao tzv. superselekciono pravilo, koje je propraćeno jednom superselekcionom opservablom. Pokazaćemo da je direktna posledica osobine o kojoj je reč da se ne mogu pojaviti svi mogući ireducibilni tenzorski operatori. Završićemo ukazujući na postojanje još dva superselekciona pravila (i još dve superselekcione opservable) u kvantnoj mehanici.

7.5.1 Rezime o celobrojnosti kvantnog broja uglovnog momenta

Videli smo da kvantni broj l orbitnog uglovnog momenta u $\mathcal{H}_o$ (o bilo kojoj čestici da se radi) uzima samo cele vrednosti. Kvantni broj spina s ima samo jednu (fiksiranu) vrednost. Najzad, pri kompoziciji dva stepena slobode sa uglovnim momentom u kompozitni stepen slobode ($\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}$, $\hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2 = \hat{\mathbf{K}}$, k_1, $k_2 \to k$) videli smo da je celobrojnost od k ista kao celobrojnost od $k_1 + k_2$

(videti L 7.1.3). Očigledno, $k_1 + k_2$ je ceo broj ako i samo ako su k_1 i k_2 jednake celobrojnosti (tj. oba su cela ili oba su polucela), inače je poluceo. Ista celobrojnost svih vrednosti od k_1 i analogno za k_2 ima za posledicu da sve vrednosti od k imaju nužno jednu te istu celobrojnost. Ovo se direktno uopštava na kompoziciju više stepeni slobode (uporediti T 7.1.3).

Dakle, u krajnjoj meri Postulat o kvantizaciji (zahvaljujući kome je l dobijen) i uvođenje spina obezbedili su da će se u svakom stepenu slobode (faktor prostoru stanja) sa uglovnim momentom pojaviti kvantni broj k čije su sve vrednosti jedne te iste celobrojnosti.

7.5.2 Superselekciono pravilo celobrojnosti

Zaključak o određenoj celobrojnosti kvantnog broja uglovnog momenta k može da se formuliše i u sledećoj formi.

Teorem 7.5.1 (Superselekciono pravilo celobrojnosti) *Ne postoje u prirodi takva stanja ψ fizičkog sistema ili njegovog stepena slobode sa uglovnim momentom koja bi mešala koherentno (tj. u smislu superpozicije) vrednosti kvantnog broja uglovnog momenta različite celobrojnosti.*

Pošto smo ovaj rezultat iskazali u vidu zabrane, govorimo, kao što je to uobičajeno, o *superselekcionom pravilu* (vršimo selekciju dozvoljenog u odnosu na nedozvoljeno). Prefiks „super" treba da naglasi da se radi o selekcionom pravilu koje je univerzalno, tj. uvek važi. Obična selekciona pravila (uporediti § 8.3.8) vezana su za određena stanja, naročito za prelaze iz jednog stanja u drugo.

Postavlja se pitanje da li se može definisati, na fizički uverljiv način, opservabla takva da celobrojnost bude u suštini njen kvantni broj. U sledeća dva paragrafa daćemo potvrdan odgovor na ovo pitanje.

Bolje razumevanje superselekcionog pravila celobrojnosti nam je važno zbog toga što postoje i druga superselekciona pravila u kvantnoj mehanici, a pokazaće se da se i poslednji postulat, Postulat o identičnim česticama u stvari svodi na superselekciono pravilo (§ 9.3.6).

7.5.3 Superselekciona opservabla

Pođimo od pretpostavke da imamo prostor stanja $\mathcal{H}$ i da je u njemu zadata vektorska opservabla uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}$, koja generiše reprezentaciju rotacione grupe $R(3)$ u $\mathcal{H}$: $\{\hat{U}(\phi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}}|\phi\mathbf{u}$ iz π-lopte$\}$. Dopustićemo da se u $\mathcal{H}$ pojavljuju vrednosti kvantnog broja k različite celobrojnosti. Namerno protivurečimo Teoremu T 7.5.1 jer ćemo upravo tako moći da produbimo njegov smisao.

Odaberimo proizvoljan ort $\mathbf{u}$, fiksirajmo ga i usmerimo ort z-ose duž $\mathbf{u}$. Rotacija za $\phi = 2\pi$ oko $\mathbf{u}$ predstavljena je u $\mathcal{H}$ operatorom

$$\hat{B} \stackrel{\text{def}}{=} e^{-\frac{i}{\hbar}2\pi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}} = e^{-\frac{i}{\hbar}2\pi\hat{K}_z}. \tag{7.5.1}$$

Neka je $\{|\, km\lambda\,\rangle|\forall k, m, \lambda\}$ standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}}$ u $\mathcal{H}$. Delujući operatorom $\hat{B}$ na pojedine vektore ovog bazisa vidimo da se delovanje svodi na množenje sa $+1$ ili sa -1, prema tome da li je m (a to znači i k) ceo ili poluceo. Dakle, $\hat{B}$ je opservabla sa dve svojstvene vrednosti: ± 1.

Obeležimo sa $\mathcal{V}_\pm$ odgovarajuće svojstvene potprostore. Spektralna dekompozicija celog prostora po opservabli $\hat{B}$ je prosto

$$\mathcal{H} = \mathcal{V}_+ \oplus \mathcal{V}_-, \tag{7.5.2}$$

a svojstveni potprostori $\mathcal{V}_+$ su istovremeno i *potprostori određene celobrojnosti* vrednosti kvantnog broja uglovnog momenta k ($\mathcal{V}_+ \Leftrightarrow k$ ceo, $\mathcal{V}_- \Leftrightarrow k$ poluceo). Dakle, opservablu $\hat{B}$ možemo nazvati *opservablom celobrojnosti.*

Vratimo se sad superselekcionom pravilu iz prethodnog paragrafa. Ono se pomoću opservable $\hat{B}$ može formulisati tako da umesto $\mathcal{H}$ dolazi u obzir samo jedan od potprostora $\mathcal{V}_+$ ili $\mathcal{V}_-$. Drugim rečima, *dozvoljeni su samo svojstveni potprostori od* $\hat{B}$, tj. svojstvene vrednosti od $\hat{B}$ se ne smeju mešati (koherentno).

Korolar 7.5.1 *Ako neki kvantni sistem u nekom trenutku ima svojstvenu vrednost b opservable $\hat{B}$, onda se ta vrednost nikad neće promeniti ni spontanom evolucijom sistema niti kao rezultat merenja.*

Dokaz: Vremenska evolucija je neprekidna, te pošto su zabranjena superponirana svojstvena stanja koja odgovaraju različitim svojstvenim vrednostima od $\hat{B}$, sistem ne može učiniti skok i preći iz $\mathcal{V}_+$ u $\mathcal{V}_-$ ili obratno (ostajući, naravno, na jediničnoj sferi u $\mathcal{H}$). Što se tiče merenja, vektori iz $\mathcal{V}_+$ i $\mathcal{V}_-$ su uzajamno ortogonalni, verovatnoća prelaza je nula, a to prema Postulatu o pojedinačnim sistemima znači da sa ovakav prelaz ne može desiti u prirodi. *Q. E. D.*

Da rezimiramo:

i) svaki kvantni sistem uvek ima jednu određenu svojstvenu vrednost od $\hat{B}$;

ii) svojstvenu vrednost od $\hat{B}$ kvantni sistem nikad ne može promeniti, ni vremenskom evolucijom, ni merenjem.

Zbog opisane uloge u sagledavanju superselekcionog pravila, opservabla $\hat{B}$ spada među opservable koje nazivamo *superselekcionim opservablama*[7.5.1].

Ograničavanja $\mathcal{H}$ na $\mathcal{V}_+$ ili $\mathcal{V}_-$ ponekad se iskazuju rečima da je $\mathcal{H}$ nekoherentan ili se kaže da su $\mathcal{V}_+$, i $\mathcal{V}_-$ uzajamno nekoherentni. Potprostori $\mathcal{V}_\pm$ nazivaju se *koherentnim potprostorima* imajući u vidu okolnost da unutar $\mathcal{V}_+$, ili $\mathcal{V}_-$ svaki vektor (tj. svaka koherentna smeša drugih vektora iz istog potprostora) ima fizičkog smisla.

Čitaocu je verovatno palo u oči da se superselekciono pravilo može relirati i sa Postulatom o stanjima, koji postulira da svaki vektor u prostoru stanja ima fizičkog smisla. Da smo zamenili $\mathcal{H}$ celim skupom $\mathcal{V}_+ \cup \mathcal{V}_-$, moglo bi se reći da superselekciono pravilo predstavlja restrikciju principa superpozicije (kao što se ponekad kaže u literaturi). Pravilnije je, međutim, reći da se radi o *preciznijem definisanju* prostora stanja sistema, na koji sa odnosi Postulat o stanjima: on mora biti ili samo $\mathcal{V}_+$ ili samo $\mathcal{V}_-$.

[7.5.1] U nekim udžbenicima kvantne mehanike superselekciono pravilo se izražava zabranom svih opservabli koje nisu kompatibilne sa superselekcionom opservablom $\hat{B}$, tj. koje se ne redukuju u $\mathcal{V}_+$ i $\mathcal{V}_-$. Međutim, to doduše jeste potrebno (sledi iz gornjeg teksta), ali ne i dovoljno. Naime, neka opservabla $\hat{A}$ može da bude kompatibilna sa $\hat{B}$ i da se neka njena svojstvena vrednost a pojavi i u $\mathcal{V}_+$ i u $\mathcal{V}_-$. Onda *a priori* postoje svojstveni vektori od $\hat{A}$ koji odgovaraju svojstvenoj vrednosti a, a da su superpozicija vektora iz $\mathcal{V}_+$ i vektora iz $\mathcal{V}_-$. Ovakve vektore bismo morali posebno zabraniti pošto mešaju svojstvene vrednosti od $\hat{B}$.

7.5.4 Fizički smisao opservable celobrojnosti

Nameće se pitanje ima li naša konkretna superselekciona opservabla $\hat{B}$ određeni fizički smisao koji bi se uklapao u naše zaključke.

Po svom fizičkom smislu $\hat{B}$ je rotacija za 2π, tj. *identična transformacija* na planu klasične fizike. Prirodno je očekivati da delovanje koje $\hat{B}$ indukuje u skupu svih pravaca, $\mathcal{P}(\mathcal{H})$, bude takođe trivijalno, tj. da ne menja ni jedan pravac.

Operator $\hat{B}$ nije samo transformacija, kao što smo videli, nego i opservabla (kao i svaki involutivni unitarni operator). U vezi sa preslikavanjem koje $\hat{B}$ indukuje u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$, dokazaćemo sledeću lemu.

Lema 7.5.1 *Ako jedna opservabla $\hat{C}$ u $\mathcal{H}$ ima dve različite svojstvene vrednosti a i b i ako je vektor $|\,\psi\,\rangle$ netrivijalna superpozicija*

$$|\,\psi\,\rangle = \alpha\,|\,a\,\rangle + \beta\,|\,b\,\rangle, \quad \alpha \neq 0 \neq \beta, \tag{7.5.3}$$

gde su $|\,a\,\rangle$ i $|\,b\,\rangle$ normirani svojstveni vektori od $\hat{C}$ uz a odnosno b, onda $\hat{C}$ menja pravac *kome pripada $|\,\psi\,\rangle$.*

Dokaz: Pođimo *ab contrario* (od suprotnog) i pretpostavimo $\hat{C}\,|\,\psi\,\rangle = \gamma\,|\,\psi\,\rangle$, gde je γ kompleksni broj. Onda, zamenjujući (7.5.3) u ovu jednakost, sledi

$$\alpha a\,|\,a\,\rangle + \beta b\,|\,b\,\rangle = \gamma\alpha\,|\,a\,\rangle + \gamma\beta\,|\,b\,\rangle. \tag{7.5.4}$$

Usled $\langle\, a\,|\,b\rangle = 0$, množeći (7.5.4) sleva sa $\langle a\,|$ dolazimo do $\alpha a = \gamma\alpha$, a množeći (7.5.4) sa $\langle b\,|$ dobijamo $\beta b = \gamma\beta$, tj. $a = \gamma = b$ (jer $\alpha \neq 0 \neq \beta$), a $a \neq b$. Kontradikcija obara polaznu pretpostavku i dokazuje $\hat{C}\,|\,\psi\,\rangle \neq \gamma\,|\,\psi\,\rangle$. *Q. E. D.*

U primeni na opservablu celobrojnosti $\hat{B}$, Lema nam kazuje da $\hat{B}$ deluje trivijalno u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ samo ako se zabrane superpozicije jednog vektora iz $\mathcal{V}_+$ i jednog iz $\mathcal{V}_-$, tj. samo ako važi superselekciono pravilo celobrojnosti. Tako da možemo biti zadovoljni fizičkim smislom superselekcionog pravila celobrojnosti: ono znači da rotacija za 2π ne izaziva nikakve promene u $\mathcal{P}(\mathcal{H})$.

7.5.5 *Ograničenje za ireducibilne tenzorske operatore

Sada ćemo izvesti jednu važnu posledicu superselekcionog pravila celobrojnosti.

Teorem 7.5.2 *U kvantnoj mehanici se pojavljuju samo ireducibilni tenzorski operatori čiji je kvantni broj uglovnog momenta* ceo *broj.*

Dokaz: Pretpostavimo, *ab contrario*, da imamo $\{\hat{T}^{(k_2)}_{m_2}|\forall m_2\}$ sa polucelim k_2, iako su sve vrednosti od k u $\mathcal{H}$ jedne te iste celobrojnosti. U standardnom bazisu za $\hat{\mathbf{K}}$ onda imamo Wigner-Eckart-ov Teorem:

$$\langle km\lambda\,|\,\hat{T}^{(k_2)}_{m_2}\,|\,k_1m_1\lambda_1\,\rangle = \langle k\lambda\,|\,|\hat{T}^{(k_2)}|\,|\,k_1\lambda_1\,\rangle(k_1k_2m_1m_2|km). \tag{7.5.5}$$

Pošto su k i k_1 iste celobrojnosti, a k_2 je poluceo, pravilo trougla $k_2 = |k-k_1|, |k-k_1|+1, \ldots, k+k_1$ ne može biti zadovoljeno. Prema tome svi matrični elementi na levoj strani su nula, tj. same komponente tenzorskog operatora su nula. *Q. E. D.*

7.5.6 Druga superselekciona pravila

Kao što ćemo videti u glavi § 11 (koja je posvećena tzv. drugoj kvantizaciji), opservabla čije su svojstvene vrednosti *broj čestica* je superselekciona opservabla. Videćemo da je to veoma važno imati na umu jer se formalizam druge kvantizacije upravo zasniva na formalnom narušavanju odgovarajućeg superselekcionog pravila broja čestica.

Iz samog načina konstrukcije prostora stanja $\mathcal{H}_{1\ldots N}^{(u)} = \mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ višečestičnog sistema jasno proizlazi da u svakom stanju sa kojim operišemo broj čestica ima određenu vrednost N. I ovde se radi o superselekcionom pravilu čiji je logički status posledica, a ne postulat. (Videti § 8.5.2 za superselekciono pravilo barionskog broja u relativističkoj kvantnoj mehanici.)

Kao što ćemo videti u § 9.3.6, može se definisati superselekciona opservabla maksimalnih simetrija identičnih čestica i, da bismo bili u skladu sa eksperimentalnim činjenicama, moraćemo postulirati odgovarajuće superselekciono pravilo maksimalne simetrije.

Glava 8

DISKRETNE, DINAMIČKE I UNUTRAŠNJE SIMETRIJE

8.1 Prostorna inverzija

Završivši kvantnu teoriju uglovnog momenta, sada smo u mogućnosti da nastavimo i upotpunimo izučavanje prostorne inverzije, koje smo započeli u § 5.1.4. U ovom odeljku izvešćemo tačnu formu kvantno-mehaničkog operatora inverzije prostora u najvažnijim faktor prostorima, koji odgovaraju osnovnim stepenima slobode jedne čestice. Reliraćemo izučavani operator sa osnovnim skupovima opservabli i sa operatorima uglovnog momenta. Analiziraćemo njegove svojstvene vrednosti, povezaćemo ga sa rotacionom grupom i definisaćemo refleksije kroz ravni.

8.1.1 Operator prostorne inverzije u orbitnom prostoru stanja

Videli smo u (5.1.7a)-(5.1.7b) da inverzija prostora $\mathcal{I}_p$ u klasičnom faznom prostoru čestica deluje na sledeći način

$$\mathcal{I}_p\mathbf{r} = -\mathbf{r}, \quad \mathcal{I}_p\mathbf{p} = -\mathbf{p}. \tag{8.1.1a,b}$$

Da bismo izveli kako deluje operator $\hat{\mathcal{I}}_p$ u orbitnom prostoru stanja $\mathcal{H}_o$ čestice[8.1.1] konstruisaćemo izomorfizam ι_7 na Crtežu C 5.2. (To je "kratica" koju smo zaobišli za Galilejeve transformacije, jer je izomorfizam ι_6 direktno sledio iz Postulata o kvantizaciji, pa smo se odlučili za njega.)

Moramo iskoristiti konkretnu korespondencu između vektora stanja i čistih ansambala (§ 2.4.6), koja omogućuje da transformaciji u faznom prostoru pridružimo transformaciju simetrije u $\mathcal{P}(\mathcal{H}_o)$ (uporediti kraj od § 5.2.1), zapravo u $\mathcal{P}(\mathcal{U}(\mathcal{H}_o))$.

Dakle, iz (8.1.1) se vidi da u $\mathcal{P}(\mathcal{U}(\mathcal{H}_0))$ traženi operator $\hat{\mathcal{I}}_p$ indukuje preslikavanje pravca od $|\,\mathbf{r}\,\rangle$ u pravac od $|\,-\mathbf{r}\,\rangle$ i istovremeno pravca od $|\,\mathbf{p}\,\rangle$ u pravac od $|\,-\mathbf{p}\,\rangle$. Prema tome, za sam $\hat{\mathcal{I}}_p$

[8.1.1]Sinonimi koji se u literaturi mogu naći za naš termin "prostorna inverzija" (ili "inverzija prostora") su: inverzija kroz koordinatni početak, refleksija, refleksija kroz koordinatni početak i, najzad, operator parnosti (jer se svojstveno stanje od $\hat{\mathcal{I}}_p$ naziva "parnost").

možemo da pišemo:

$$\hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{r}\,\rangle = e^{\imath\lambda(\mathbf{r})} \mid -\mathbf{r}\,\rangle,\ \forall\mathbf{r}; \quad \hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{p}\,\rangle = e^{\imath\omega(\mathbf{p})} \mid -\mathbf{p}\,\rangle,\ \forall\mathbf{p}, \qquad (8.1.2a,b)$$

a iz Wigner-ovog teorema znamo da je $\hat{\mathcal{I}}_p$ unitaran ili antiunitaran operator.

Delovanjem sa $\hat{\mathcal{I}}_p$ na svojstvenu jednakost od $\hat{\mathbf{r}}$ dolazimo do $(\hat{\mathcal{I}}_p\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{I}}_p^{-1})(\hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{r}\,\rangle) = \mathbf{r}(\hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{r}\,\rangle)$, što na osnovu (8.1.2) prelazi u $(\hat{\mathcal{I}}_p\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{I}}_p^{-1}) \mid -\mathbf{r}\,\rangle = \mathbf{r} \mid -\mathbf{r}\,\rangle$, $\forall\mathbf{r}$. (Naime, iz $\hat{\mathcal{I}}_p\hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = \hat{\mathcal{I}}$ (identični operator) vidimo da je $\hat{\mathcal{I}}_p^{-1}$ iste prirode kao $\hat{\mathcal{I}}_p$ (unitaran ili antiunitaran). Onda vidimo da je $\hat{\mathcal{I}}_p\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{I}}_p^{-1}$ svakako linearan, pa smo mogli skratiti fazni faktor.)

pošto je $\hat{\mathcal{I}}_p\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{I}}_p^{-1}$ sigurno linearni operator jer se $\hat{\mathcal{I}}_p$ dva puta pojavljuje; fazni faktor smo skratili). Prema tome,

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_p\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = -\hat{\mathbf{r}}}, \qquad (8.1.3)$$

jer spektralna forma definiše operator jednoznačno. Potpuno analogno iz svojstvene jednakosti od $\hat{\mathbf{p}}$ i (8.1.2) sledi

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_p\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = -\hat{\mathbf{p}}}. \qquad (8.1.4)$$

Teorem 8.1.1 *Operator $\hat{\mathcal{I}}_p$ je* unitaran, *a na svojstveni bazis $\{\mid \mathbf{r}\,\rangle \mid \forall\mathbf{r}\}$ od $\hat{\mathbf{r}}$ deluje na sledeći način*

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{r}\,\rangle = \mid -\mathbf{r}\,\rangle,\ \forall\mathbf{r}}. \qquad (8.1.5)$$

Dokaz: Neka je $\hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{r}=0\rangle = e^{\imath\varphi_0} \mid \mathbf{r}=0\rangle$. Onda $\hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{r}\rangle = \hat{\mathcal{I}}_p e^{-\frac{\imath}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}} \mid \mathbf{r}=0\rangle = e^{-\frac{1}{\hbar}(\hat{\mathcal{I}}_p\imath\hat{\mathcal{I}}_p^{-1})\mathbf{r}\cdot(\hat{\mathcal{I}}_p\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{I}}_p^{-1})}\hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{r}=0\rangle = e^{\pm\frac{\imath}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}}e^{\imath\varphi_0} \mid \mathbf{r}=0\,\rangle = e^{\imath\varphi_0} \mid \mp\mathbf{r}\,\rangle$. Iskoristili smo konvenciju (2.6.10) u definiciji bazisa $\{\mid \mathbf{r}\,\rangle \mid \forall\mathbf{r}\}$, a (8.1.4) smo uzeli u obzir kad smo razvili eksponencijalnu funkciju (operatorsku) u red. Gornji predznak važi ako je $\hat{\mathcal{I}}_p$ unitaran a donji ako je antiunitaran. Iz (8.1.2) je jasno da je $\hat{\mathcal{I}}_p$ unitaran.
Pošto pri prenošenju transformacije iz $\mathcal{P}(\mathcal{H}_o)$ u $\mathcal{H}_o$ ionako imamo jedan fazni faktor potpuno proizvoljan (uporediti T 5.2.1.B), definišimo $\varphi_0 \stackrel{\text{def}}{=} 0$ radi što veće jednostavnosti. *Q. E. D.*

Lako se vidi da je $\hat{\mathcal{I}}_p$ *involucija.*

Teorem 8.1.2 *Na svojstveni bazis $\{\mid \mathbf{p}\,\rangle \mid \forall\mathbf{p}\}$ od $\hat{\mathbf{p}}$ operator prostorne inverzije $\hat{\mathcal{I}}_p$ deluje po formuli*

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{p}\,\rangle = \mid -\mathbf{p}\,\rangle,\ \forall\mathbf{p}}. \qquad (8.1.6)$$

Dokaz je analogan dokazu Teorema T 8.1.1.

Zadatak 8.1.1 Dokazati Teorem T 8.1.2.

Zadatak 8.1.2 Pokazati kako iz (8.1.5) i (8.1.6) sledi, obeležavajući reprezentant od $\hat{\mathcal{I}}_p$ u koordinatnoj reprezentaciji nepromenjeno sa $\hat{\mathcal{I}}_p$, da imamo

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_p\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}), \quad \forall\psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbf{r})} \qquad (8.1.7)$$

i analogno u impulsnoj reprezentaciji

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_p\,\varphi(\mathbf{p}) = \varphi(-\mathbf{p}), \quad \forall\varphi(\mathbf{p}) \in \mathcal{L}^2(\mathbf{p})}. \qquad (8.1.8)$$

8.1.2 Pitanje konzistentnosti zaključka o unitarnosti operatora prostorne inverzije

Da bismo se osvedočili o konzistentnosti Wigner-ovog teorema na ovom prvom konkretnom primeru operatora $\hat{\mathcal{I}}_p$, izvešćemo zaključak o unitarnoj prirodi ovog operatora na još nekoliko načina.

(i) Osnovne komutacione relacije u $\mathcal{H}_o$, tj.

$$[\,\hat{q}, \hat{p}_q\,] = \imath\hbar, \quad q = x, y, z, \tag{8.1.9}$$

prelaze, usled (8.1.3) i (8.1.4), pod delovanjem operatora $\hat{\mathcal{I}}_p$ u

$$[\,\hat{q}, \hat{p}_q\,] = \pm\imath\hbar, \quad q = x, y, z, \tag{8.1.10}$$

pri čemu + stoji ako je $\hat{\mathcal{I}}_p$ unitaran, a − ako je antiunitaran (unitaran, a ne antiunitaran operator jr kanoničan, što će reći da preslikava kanoničan par operatora u isti takav).

(ii) Pišući opet gornji predznak za slučaj unitarnosti a donji za slučaj antiunitarnosti operatora $\hat{\mathcal{I}}_p$ i koristeći se sa (8.1.5), imamo

$$\hat{\mathcal{I}}_p \mid \mathbf{p}\,\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \hat{\mathcal{I}}_p \int e^{\frac{\imath}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \mid \mathbf{r}\,\rangle \, \mathrm{d}\mathbf{r} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int e^{\pm\frac{\imath}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \mid -\mathbf{r}\,\rangle \, \mathrm{d}\mathbf{r}$$

($\hat{\mathcal{I}}_p$ je sigurno neprekidan operator, zato ulazi pod integral i u argument eksponencijalne funkcije). Zamena $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ pod integralom daje $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int e^{\mp\frac{\imath}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \mid \mathbf{r}\,\rangle \, \mathrm{d}\mathbf{r} = \mid \mp\mathbf{p}\,\rangle$. Iz (8.1.6) se onda vidi da važi gornji predznak, tj. da je $\hat{\mathcal{I}}_p$ unitaran.

(iii) Klasično imamo $\mathcal{I}_p T_{\mathbf{a}} \mathcal{I}_p^{-1} = T_{-\mathbf{a}}$, $\forall\mathbf{a}$, gde su $T_{\mathbf{a}}$ (prostorne) translacije (uporediti 5.1.1*a*). Pri prelasku na kvantnu mehaniku, na osnovu (8.1.4) sledi (opet ostavljajući gornji predznak za unitaran, a donji za antiunitaran $\hat{\mathcal{I}}_p$): $\hat{\mathcal{I}}_p \hat{U}_a \hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = \hat{\mathcal{I}}_p e^{-\frac{\imath}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}} \hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = e^{\pm\frac{\imath}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}} = \hat{U}_{\mp\mathbf{a}}$. Na osnovu zahteva da se proširena Euklidova grupa izomorfno kvantuje, opet sledi da $\hat{\mathcal{I}}_p$ mora biti unitaran.

Zadatak 8.1.3 Ponoviti rezonovanje iz (*iii*) zamenjujući translacije rotacijama.

Zadatak 8.1.4 Ponoviti rezonovanje iz *(ii)* uzajamno zamenjujući ulogu $\mid \mathbf{p}\,\rangle$ i $\mid \mathbf{r}\,\rangle$.

Zadatak 8.1.5 Ponoviti rezonovanje iz *(i)* zamenjujući (8.1.9) sa $[\,\hat{l}_x, \hat{l}_y\,] = \imath\hbar\hat{l}_z$.

Zadatak 8.1.6 Šta je zajedničko u svim navedenim dokazima unitarnosti $\hat{\mathcal{I}}_p$, tj. na šta se svi oni oslanjaju ?

8.1.3 Spektralne osobine operatora prostorne inverzije

Teorem 8.1.3 *Operator prostorne inverzije $\hat{\mathcal{I}}_p$ u orbitnom prostoru $\mathcal{H}_o$ jedne čestice je istovremeno i diskretna transformacija simetrije*[8.1.2] *i* opservabla. *Svojstvene vrednosti od $\hat{\mathcal{I}}_p$ se nazivaju* parnosti *i iznose* ± 1.

[8.1.2] Kao što smo i ranije primetili, za transformaciju se kaže da je kontinualna ili diskretna već prema tome da li se sa nje može ili ne može kontinualno preći na identični operator. A njen kvantno-mehanički operator je svakako neprekidan (tj. ograničen) operator (jer je unitaran ili antiunitaran).

Dokaz: Prvi iskaz sledi iz činjenice što smo $\hat{\mathcal{I}}_p$ pridružili klasičnoj transformaciji simetrije $\mathcal{I}_p$, a drugi sledi iz toga što je $\hat{\mathcal{I}}_p$ u $\mathcal{H}_o$ involutivni operator, tj. $\hat{\mathcal{I}}_p = \hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = \hat{\mathcal{I}}_p^\dagger$, te je i hermitski $\hat{\mathcal{I}}_p = \hat{\mathcal{I}}_p^\dagger$. Ako su a i $|\,a\,\rangle$ svojstvena vrednost i odgovarajući svojstveni vektor od $\hat{\mathcal{I}}_p$, primenjujući $\hat{\mathcal{I}}_p^2 = \hat{I}$ na $|\,a\,\rangle$, zaključujemo da $a^2 = 1$, tj. $a = \pm 1$. Obe svojstvene vrednosti se moraju pojaviti u $\mathcal{H}_o$, inače bi $\hat{\mathcal{I}}_p$ bio broj (a već znamo da nije). *Q. E. D.*

Neka su $\hat{P}_+$ i $\hat{P}_-$ svojstveni projektori od $\hat{\mathcal{I}}_p$ koji odgovaraju svojstvenim vrednostima 1, odnosno -1. Onda je spektralna forma od $\hat{\mathcal{I}}_p$ data sa

$$\hat{\mathcal{I}}_p = \hat{P}_+ - \hat{P}_-, \tag{8.1.11}$$

a

$$\hat{I} = \hat{P}_+ + \hat{P}_- \tag{8.1.12}$$

je odgovarajuće razlaganje identičnog operatora. Iz (8.1.11) i (8.1.12) očigledno sledi

$$\hat{P}_+ = \frac{1}{2}(\hat{I} + \hat{\mathcal{I}}_p), \quad \hat{P}_- = \frac{1}{2}(\hat{I} - \hat{\mathcal{I}}_p). \tag{8.1.13a,b}$$

Ako pređemo na reprezentaciju radijus vektora, a ne menjamo notaciju za operatore, onda se zbog (8.1.13) razlaganje identičnog operatora (8.1.12) na sledeći način ogleda na proizvoljnoj talasnoj funkciji:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[\psi(\mathbf{r}) + \psi(-\mathbf{r})] + \frac{1}{2}[\psi(\mathbf{r}) - \psi(-\mathbf{r})], \tag{8.1.14}$$

tj. radi se o dobro poznatom jedinstvenom razlaganju funkcije na zbir parne i neparne funkcije. Drugim rečima, $\hat{P}_+\psi(\mathbf{r})$ i $\hat{P}_-\psi(\mathbf{r})$ su parne, odnosno neparne funkcije (otud naziv za svojstvene vrednosti).

Operatori $\hat{A}_\pm$ za koje važi

$$\hat{\mathcal{I}}_p\,\hat{A}_+\,\hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = \hat{A}_+, \quad \hat{\mathcal{I}}_p\,\hat{A}_-\,\hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = -\hat{A}_- \tag{8.1.15a,b}$$

nazivaju se parni, odnosno neparni operatori.

Zadatak 8.1.7 Pokazati da se proizvoljan operator $\hat{A}$ jednoznačno razlaže na jedan paran i jedan neparan operator

$$\hat{A} = \hat{A}_+ + \hat{A}_- \tag{8.1.16a}$$

i da pri tome važi[8.1.3]

$$\hat{A}_+ = \frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{\mathcal{I}}_p\hat{A}\,\hat{\mathcal{I}}_p^{-1}), \quad \hat{A}_- = \frac{1}{2}(\hat{A} - \hat{\mathcal{I}}_p\,\hat{A}\,\hat{\mathcal{I}}_p^{-1}). \tag{8.1.2}$$

Parni i neparni operatori za $\hat{\mathcal{I}}_p$ su analogoni ireducibilnih tenzorskih operatora za uglovni moment (ili rotacije). Postoji i *analogon Wigner-Eckart-ovog teorema* za $\hat{\mathcal{I}}_p$ (bar što se tiče selekcionih pravila):

Zadatak 8.1.8 Neka je $\langle\psi\,|\,\hat{A}\,|\,\varphi\rangle$ takav matrični element da $\langle\psi\,|$, $\hat{A}$ i $|\,\varphi\rangle$ imaju određenu parnost ($\hat{A}$ u smislu (8.1.15)). Pokazati da od $2^3 = 8$ kombinacija otpada polovina, tj. da su jednaki nuli svi matrični elementi koji narušavaju sledeće selekciono pravilo parnosti:

$$\text{parnost od } \langle\psi\,|, \text{ parnost od } \hat{A} \text{ i parnost od } |\,\varphi\rangle \text{ se množe u 1.} \tag{8.1.17}$$

[8.1.3] $\hat{\mathcal{I}}_p \ldots \hat{\mathcal{I}}_p^{-1}$ je, naravno, superoperator koji u prostoru operatora odgovara transformaciji $\mathcal{I}_p$. Relacija (8.1.15) definiše njegove svojstvene vektore.

Zadatak 8.1.9 Prodiskutovati analogiju i različitost između Wigner-Eckart-ovog teorema za $\hat{\mathbf{K}}$ i (8.1.17).

Vektorski operator čije su sve tri komponente neparni operatori nazivaju se polarno vektorskim operatorima. Takvi su $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$. S druge strane, ako su sve tri komponente vektorskog operatora parni operatori, onda se, kao i u klasičnoj fizici, govori o aksijalno vektorskom ili o pseudovektorskom operatoru. Najvažniji primer takvog operatora u $\mathcal{H}_o$ je $\hat{\mathbf{l}}$:

$$\hat{\mathcal{I}}_p \hat{\mathbf{l}} \hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = \hat{\mathbf{l}}, \tag{8.1.18}$$

usled $\hat{\mathbf{l}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ i (8.1.3) i (8.1.4).

8.1.4 Prave i neprave rotacije

Što se tiče rotacija $\hat{U}(\varphi\mathbf{u}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{l}}}$ u $\mathcal{H}_o$, iz (8.1.18) očigledno sledi

$$\hat{\mathcal{I}}_p \hat{U}(\varphi\mathbf{u}) \hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = \hat{U}(\varphi\mathbf{u}) \quad \Longleftrightarrow \quad [\, \hat{\mathcal{I}}_p, \hat{U}(\varphi\mathbf{u}) \,] = 0, \ \forall \varphi\mathbf{u} \in \pi - \text{sfera}. \tag{8.1.19a,b}$$

Znači, očuvan je odnos $\mathcal{I}_p$ i $R_{\varphi\mathbf{u}}$ koji je važio u klasičnoj fizici.

Ako se zapitamo šta je najmanja nadgrupa rotacione grupe R(3) takva da sadrži $\mathcal{I}_p$, lako se vidi da je to direktni proizvod rotacione grupe i ciklusa od $\mathcal{I}_p$ (tj. grupe koja pored $\mathcal{I}_p$ sadrži i sve njene stepene, a to znači samo još I u ovom slučaju):

$$\mathrm{R}(3) \otimes \{\hat{\mathcal{I}}_p, I\} = \mathrm{R}(3) + \hat{\mathcal{I}}_p \{R_{\varphi\mathbf{u}} \mid \varphi\mathbf{u} \in \pi - \text{sfera}\} = \mathrm{R}(3) + \hat{\mathcal{I}}_p \mathrm{R}(3), \tag{8.1.20}$$

gde + označava uniju klasâ (tj. podskupova koji nemaju preseka). Desna strana od (8.1.20) prikazuje dotični direktni proizvod razložen na dve klase: invarijantnu podgrupu R(3) i (jedini) koset $\hat{\mathcal{I}}_p \mathrm{R}(3)$.

Grupa transformacija (8.1.20) je izomorfna (preko "reprezentovanja", uporediti "4" na Crtežu C 5.2) tzv. *potpunoj ortogonalnoj grupi* (realnoj) u tri dimenzije:

$$\mathrm{O}(3) = \mathrm{SO}(3) + \hat{\mathcal{I}}_p \mathrm{SO}(3). \tag{8.1.21}$$

Grupa matrica O(3) sadrži sve realne ortogonalne matrice 3×3 (ortogonalnost znači $R^T = R^{-1}$) a $\hat{\mathcal{I}}_p$ (to je sad matrica) se svodi na[8.1.4] $-I$.

Da bismo razlikovali operatore koji pripadaju prvom sabirku u (8.1.20) ili (8.1.21) od onih koji pripadaju drugom sabirku, govorimo o *pravim* za razliku od *nepravih rotacija* (sinonim: svojstvene odnosno nesvojstvene rotacije[8.1.5]).

[8.1.4] Da se podsetimo da $R^T = R^{-1} \Rightarrow \det R = \det R^{-1}$, stoga $\det R^2 = \det R \det R = \det R \det R^{-1} = 1 \Rightarrow \det R = \pm 1$. Osobina $\det R = 1$ karakteriše elemente $R \in \mathrm{SO}(3)$, a $\det R = -1$ karakteriše elemente $R \in \hat{\mathcal{I}}_p \mathrm{SO}(3)$, jer $\det \hat{\mathcal{I}}_p = -1$.

[8.1.5] Engleski: *proper and improper rotations.*

8.1.5 Refleksije kroz ravni

Pošto $\mathcal{I}_p$ komutira sa svakom pravom rotacijom, a involucija je, neprava rotacija $\mathcal{I}_p R_{\varphi\mathbf{u}}$ će takođe biti involucija ako i samo ako je $R_{\varphi\mathbf{u}}$ involucija. A rotacija je involucija tada i samo tada kada je $\varphi = \pi$. Znači, pored $\mathcal{I}_p$ involutivne su još i sve neprave rotacije vida

$$R_{\mathbf{u}} \stackrel{\text{def}}{=} R_{\pi\mathbf{u}}\mathcal{I}_p. \tag{8.1.22}$$

To su tzv. *refleksije kroz ravni* ili ogledalne refleksije (radi se o ravni koja je normalna na ort $\mathbf{u}$).

Koliko god da je neosporno matematički $\mathcal{I}_p$ primitivniji entitet od $R_{\mathbf{u}}$ (i pre svega jedinstven za dati koordinatni početak) zahvaljujući našoj naviknutosti na ogledalo, $R_{\mathbf{u}}$ ima jasnije intuitivno značenje. Zato je za neke primene korisno rešiti (8.1.22) po $\mathcal{I}_p$:

$$\mathcal{I}_p = R_{\pi\mathbf{u}}R_{\mathbf{u}}, \tag{8.1.23}$$

i to radi lakšeg zamišljanja šta u prostoru čini $\mathcal{I}_p$. Pri tome je $\mathbf{u}$ arbitraran ort; drugim rečima, ogledalna ravan na proizvoljan način prolazi kroz koordinatni početak. Relacija (8.1.23) kazuje da je posle ogledalne refleksije potrebna kompenzatorna rotacija oko ose ortogonalne na dotičnu ravan za ugao $\varphi = \pi$ da bismo imali dejstvo od $\mathcal{I}_p$.

Sve se ove relacije izomorfno prenose na operatore u Hilbertovom prostoru:

$$\hat{U}(\mathbf{u}) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}(\pi\mathbf{u})\,\hat{\mathcal{I}}_p, \tag{8.1.24}$$

$$\hat{\mathcal{I}}_p = \hat{U}(\pi\mathbf{u})\,\hat{U}(\mathbf{u}). \tag{8.1.25}$$

Zadatak 8.1.10 Pokazati da važe sledeće relacije:

$$R_{\mathbf{u}}\,\mathbf{r} = \mathbf{r} - 2\mathbf{u}\,(\mathbf{u}\cdot\mathbf{r}), \quad R_{\mathbf{u}}\,\mathbf{p} = \mathbf{p} - 2\mathbf{u}\,(\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}), \tag{8.1.26a,b}$$

$$R_{\mathbf{u}}\,\mathbf{l} = \mathbf{l} - 2\mathbf{u}\,(\mathbf{u}\cdot\mathbf{l}). \tag{8.1.26c}$$

Pokazati da važe i analogne kvantne relacije

$$\hat{U}(\mathbf{u})\,\hat{\mathbf{r}}\,\hat{U}^{-1}(\mathbf{u}) = \hat{\mathbf{r}} - 2\mathbf{u}(\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{r}}), \quad \hat{U}(\mathbf{u})\,\hat{\mathbf{p}}\,\hat{U}^{-1}(\mathbf{u}) = \hat{\mathbf{p}} - 2\mathbf{u}(\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{p}}), \tag{8.1.27a,b}$$

$$\hat{U}(\mathbf{u})\,\hat{\mathbf{l}}\,\hat{U}^{-1}(\mathbf{u}) = \hat{\mathbf{l}} - 2\mathbf{u}(\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{l}}). \tag{8.1.27c}$$

8.1.6 Prostorna inverzija i sferni harmonici

U pogledu faktorizacije $\mathcal{L}^2(r,\theta,\varphi) = \mathcal{L}^2(r)\otimes\mathcal{L}^2(\theta)\otimes\mathcal{L}^2(\varphi)$, očigledno važi

$$\hat{\mathcal{I}}_p = \hat{I}_r \otimes \hat{\mathcal{I}}_\Omega^{(p)} \tag{8.1.28}$$

tj. $\hat{\mathcal{I}}_p$, kao i $\hat{\mathbf{l}}$, deluje *netrivijalno samo u uglovnom faktor prostoru stanja.*

Takođe je očigledno da u pogledu faktorizacije $\mathcal{L}^2(\Omega) = \mathcal{L}^2(\theta)\otimes\mathcal{L}^2(\varphi)$ uglovni faktor operator $\hat{\mathcal{I}}_\Omega^{(p)}$ se faktoriše

$$\hat{\mathcal{I}}_\Omega^{(p)} = \hat{\mathcal{I}}_\theta^{(p)} \otimes \hat{\mathcal{I}}_\varphi^{(p)} \tag{8.1.29a}$$

i to tako da

$$\hat{\mathcal{I}}^{(p)}_\theta\, g(\theta) = g(\pi - \theta), \quad \hat{\mathcal{I}}^{(p)}_\varphi\, h(\varphi) = h(\varphi \pm \pi), \quad \forall g(\theta) \in \mathcal{L}^2(\theta),\ \forall h(\varphi) \in \mathcal{L}^2(\varphi). \qquad (8.1.29b,c)$$

U (8.1.29b)-(8.1.29c) imamo plus ako je $0 \le \varphi \le \pi$, inače imamo minus.

Nećemo uvek pisati uglove kao indekse operatora, nekad ćemo, po potrebi, rečima istaći u kom faktor prostoru $\hat{\mathcal{I}}_p$ deluje.

Usled $[\,\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathcal{I}}_p\,] = 0$, $\hat{\mathcal{I}}_p$ mora da se redukuje u uzajamno ekvivalentne operatore u svih $2l+1$ "vrsta" (ili "fioka") višestrukog ireducibilnog potprostora za $\hat{\mathbf{l}}$ (uporediti Teorem T 6.3.2 i Crtež C 6.2). U $\mathcal{L}^2(\Omega)$ nemamo višestrukosti, tj. $d_l = 1$, $l = 0, 1, \ldots$, prema tome, $\hat{\mathcal{I}}_p$ mora da se redukuje u svakom kvadratiću pravougaonika od jedne kolone (na jeziku Crteža C 6.2) i to "jednako". Linearan operator u pravcu (kvadratiću) je množenje brojem, u našem slučaju ekvivalentnost zahteva isti broj (kao što je očigledno iz S 6.3.2). Drugim rečima, cela "kolona" $\mathcal{V}_l \subset \mathcal{L}^2(\Omega)$ je potprostor jednog svojstvenog potprostora od $\hat{\mathcal{I}}_p$. Pitanje je samo koja je odgovarajuća svojstvena vrednost od $\hat{\mathcal{I}}_p$.

Teorem 8.1.4 *Prostorna inverzija $\hat{\mathcal{I}}_p$ deluje na multiplet sfernih harmonika $\{Y_l^m(\theta,\varphi) \mid m = -l, \ldots, l\}$ kao $(-1)^l$:*

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_p\, Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^l\, Y_l^m(\theta,\varphi), \quad \forall l, m}. \qquad (8.1.30)$$

Dokaz: Sferni harmonik $Y_l^m(\theta,\varphi)$ je s tačnošću do konstante dat funkcijom

$$(1-\cos^2\theta)^{|m|/2}\, \frac{\mathrm{d}^{|m|}}{\mathrm{d}\cos^{|m|}\theta}\, \frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}\cos^l\theta}(\cos^2\theta - 1)^l\, e^{\imath m\varphi}$$

(uporediti (6.6.7) i (6.6.4a)-(6.6.5a)). Iz (8.1.29b)-(8.1.29c) vidimo da delovanjem sa $\hat{\mathcal{I}}_p$ na Y_l^m, $\cos\theta$ prelazi u $-\cos\theta$, tako da se $e^{\imath m\varphi}$ množi sa $(-1)^m$, a ostatak sa $(-1)^{|m|}\,(-1)^l$. Pošto je m ceo broj, $(-1)^m = (-1)^{|m|}$ i ostaje samo $(-1)^l$. *Q. E. D.*

8.1.7 Inverzija prostora u spinskom i ukupnom prostoru stanja

Što se tiče spinskog faktor prostora $\mathcal{H}_s$, pošto je $\hat{\mathbf{s}}$ iste fizičke prirode kao $\hat{\mathbf{l}}$, mora da se jednako transformiše pod $\hat{\mathcal{I}}_s^{(p)}$ kao $\hat{\mathbf{l}}$ pod $\hat{\mathcal{I}}_\Omega^{(p)}$. Dakle, $\hat{\mathcal{I}}_s^{(p)}$ mora da komutira sa $\hat{\mathbf{s}}$ ili ekvivalentno (izostavljajući indeks):

$$\hat{\mathcal{I}}\,\hat{\mathbf{s}}\,\hat{\mathcal{I}}^{-1} = \hat{\mathbf{s}}, \qquad (8.1.31)$$

da bismo u ukupnom prostoru čestice imali

$$\hat{\mathcal{I}}\,\hat{\mathbf{j}}\,\hat{\mathcal{I}}^{-1} = \hat{\mathbf{j}}. \qquad (8.1.32)$$

$\hat{\mathcal{I}}$ treba takođe da komutira sa svim pravim rotacijama u $\hat{\mathcal{H}}_s$ kako bismo imali reprezentaciju potpune ortogonalne grupe O(3) i u $\hat{\mathcal{H}}_s$.

Pošto je $\hat{\mathcal{H}}_s$ analogon jednog jedinog invarijantnog ireducibilnog potprostora $\mathcal{V}_l \subset \mathcal{L}^2(\Omega)$, rezonovanjem kao gore (iznad Teorema T 8.1.4), vidimo da $\hat{\mathcal{I}}_p$ mora biti konstanta, tj. 1 ili -1. Dakle,

$$\hat{\mathcal{I}}_s^{(p)} = \pm \hat{I}_s = \pm 1. \qquad (8.1.33)$$

Ova tzv. *unutrašnja parnost* čestice je jedna od unutrašnjih karakteristika čestice (videti Tabelu Tb 8.1 za hadrone, na primer).

Pišući ukupan prostor čestice u vidu $\mathcal{L}^2(r)\otimes\mathcal{L}^2(\Omega)\otimes\hat{\mathcal{H}}_s$, operator parnosti ima sledeću formu:

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_p = \pm\hat{I}_r \otimes \hat{\mathcal{I}}_\Omega^{(p)} \otimes \hat{I}_s}. \tag{8.1.34}$$

Zadatak 8.1.11 * Napisati delovanje $\hat{\mathcal{I}}_p$ na $(2s+1)$-komponentne vektore stanja u impulsnoj reprezentaciji ukupnog prostora čestice spina s.

Ako imamo česticu sa polucelim spinom i $\hat{\mathcal{I}}_p$ posmatramo u ukupnom prostoru $\mathcal{H}_u$ kao element potpune ortogonalne grupe, onda zbog toga što ga možemo pisati u vidu

$$\hat{\mathcal{I}}_p = \hat{U}(\varphi\mathbf{u})\,\hat{\mathcal{I}}_p\,\hat{U}(\varphi(-\mathbf{u})), \tag{8.1.35}$$

a $\hat{U}(\varphi\mathbf{u})$ je dvoznačan (uporediti kraj od § 6.10.4), i sam operator $\hat{\mathcal{I}}_p$ je takođe *dvoznačan.* Ali kada je reč o $\hat{\mathcal{I}}_p$ izdvojeno (iz potpune ortogonalne grupe), onda je to jednoznačan operator, kao što smo videli.

8.1.8 Inverzija prostora u višečestičnom prostoru stanja

Operator prostorne inverzije se na sledeći način definiše u N-čestičnom ukupnom prostoru stanja $\mathcal{H}_{1\ldots N}^{(u)} = \mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$:

$$\hat{\mathcal{I}}_{1\ldots N}^{(p)} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{I}}_1^{(p)} \otimes \ldots \otimes \hat{\mathcal{I}}_N^{(p)}, \tag{8.1.36}$$

gde je $\hat{\mathcal{I}}_1^{(p)}$ operator inverzije prostora u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ itd.

Fizički smisao definicije (8.1.36) sastoji se u tome da na vektore stanja svih N čestica deluje isti operator $\hat{\mathcal{I}}_p$ (koji u $\mathcal{H}_i^{(u)}$ pišemo kao $\hat{\mathcal{I}}_i^{(p)}$, $i = 1, 2, \ldots, N$).

Operator parnosti spada u tzv. *multiplikativne operatore*, jer za njega važi (8.1.36) (misli se na multiplikaciju u smislu direktnog ili tenzorskog proizvoda). Tu spadaju i sve Galilejeve transformacije kao i operator vremenske inverzije, koji ćemo proučiti u sledećem odeljku.

8.2 * Vremenska inverzija

U punoj analogiji sa našim postupkom u prethodnom odeljku, na osnovu Wigner-ovog teorema o operatorima simetrije izvešćemo kako glasi operator vremenske inverzije u orbitnom prostoru stanja. Raspravićemo da li antiunitarni operatori kada su hermitski mogu biti opservable i reliraćemo operator vremenske inverzije sa najvažnijim reprezentacijama i sa sfernim harmonicima. Konstruisaćemo operator inverzije vremena u spinskom faktor prostoru čestice, kao i u ukupnom prostoru stanja jedne i više čestica. Na kraju, iskoristićemo jedan operator koji je antiunitarna involucija za suženje pojma standardnog bazisa i pomoću njega ćemo dokazati da su svi Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti realni.

8.2.1 Operator vremenske inverzije u orbitnom prostoru stanja

U punoj analogiji sa $\hat{\mathcal{I}}_p$ (8.1.1), poći ćemo od klasičnih relacija

$$\mathcal{I}_v\,\mathbf{r} = \mathbf{r}, \quad \mathcal{I}_v\,\mathbf{p} = -\mathbf{p}. \tag{8.2.1a,b}$$

One, preko skupa svih pravaca $\mathcal{P}(\mathcal{U}(\mathcal{H}_o))$, povlače za operator $\hat{\mathcal{I}}_v$ u $\mathcal{H}_o$ sledeće delovanje:

$$\hat{\mathcal{I}}_v \mid \mathbf{r}\,\rangle = e^{\imath\lambda(\mathbf{r})} \mid \mathbf{r}\,\rangle,\ \forall\mathbf{r}; \quad \hat{\mathcal{I}}_v \mid \mathbf{p}\,\rangle = e^{\imath\omega(\mathbf{p})} \mid -\mathbf{p}\,\rangle,\ \forall\mathbf{p}, \tag{8.2.2a,b}$$

Primenjujući $\hat{\mathcal{I}}_v$ na svojstvenu jednakost od $\hat{\mathbf{r}}$ i na svojstvenu jednakost od $\hat{\mathbf{p}}$, na osnovu (8.2.2) imamo

$$(\hat{\mathcal{I}}_v\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{I}}_v^{-1}) \mid \mathbf{r}\,\rangle = \mathbf{r} \mid \mathbf{r}\,\rangle, \quad (\hat{\mathcal{I}}_v\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{I}}_v^{-1}) \mid -\mathbf{p}\,\rangle = \mathbf{p} \mid -\mathbf{p}\,\rangle, \tag{8.2.3a,b}$$

iz čega sledi da $\hat{\mathcal{I}}_v$ deluje na sledeći način na osnovni skup opservabli u $\mathcal{H}_o$:

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v\,\hat{\mathbf{r}}\,\hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = \hat{\mathbf{r}}, \quad \hat{\mathcal{I}}_v\,\hat{\mathbf{p}}\,\hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{\mathbf{p}}}. \tag{8.2.4a,b}$$

Teorem 8.2.1 *Operator vremenske inverzije $\hat{\mathcal{I}}_v$ je* antiunitaran*, a njegovo delovanje na svojstveni bazis $\{\mid \mathbf{r}\,\rangle \mid \forall\mathbf{r}\}$ od $\hat{\mathbf{r}}$ sastoji se u sledećem:*

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v \mid \mathbf{r}\,\rangle = \mid \mathbf{r}\,\rangle,\ \forall\mathbf{r}}. \tag{8.2.5}$$

Dokaz: Kao i u dokazu Teorema T 8.1.1 pođimo od $\hat{\mathcal{I}}_v \mid \mathbf{r}=0\,\rangle = e^{\imath\varphi_0} \mid \mathbf{r}=0\,\rangle$. Onda sledi $\hat{\mathcal{I}}_v \mid \mathbf{r}\,\rangle = \hat{\mathcal{I}}_v\, e^{-\frac{\imath}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}} \mid \mathbf{r}=0\,\rangle = e^{-\frac{\imath}{\hbar}(\pm\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{p}}} e^{\imath\varphi_0} \mid \mathbf{r}=0\,\rangle = e^{\imath\varphi_0} \mid \pm\mathbf{r}\,\rangle$ (gornji znak važi ako je $\hat{\mathcal{I}}_v$ linearan, a donji ako je antilinearan). Po konvenciji uzećemo $\varphi = 0$. *Q. E. D.*

Napomena: Neka je $\mid \psi\,\rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{r}\,\psi(\mathbf{r}) \mid \mathbf{r}\,\rangle \in \mathcal{H}_o$ proizvoljan vektor; onda je

$$\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi\,\rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{r}\,\psi^*(\mathbf{r}) \mid \mathbf{r}\,\rangle \in \mathcal{H}_o, \tag{8.2.6}$$

gde zvezdica označava kompleksno konjugovanje (potiče od antilinearnosti).

Zadatak 8.2.1 Pokazati da je $\hat{\mathcal{I}}_v$ involucija u $\mathcal{H}_0$.

Teorem 8.2.2 *Operator inverzije vremena $\hat{\mathcal{I}}_v$ deluje na svojstveni bazis vektorskog operatora impulsa $\hat{\mathbf{p}}$ preko formule:*

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v \mid \mathbf{p}\,\rangle = \mid -\mathbf{p}\,\rangle,\ \forall\mathbf{p}}. \tag{8.2.7}$$

Dokaz: Dokaz je analogan dokazu Teorema T 8.2.1. *Q. E. D.*

Zadatak 8.2.2 Dokazati Teorem T 8.2.2.

Zadatak 8.2.3 Pokazati rezonovanjem kao pod *(i)*, *(ii)* i *(iii)* u § 8.1.2 da je $\hat{\mathcal{I}}_v$ antiunitaran.

Korolar 8.2.1 *Operator vremenske inverzije $\hat{\mathcal{I}}_v$ deluje na orbitni uglovni moment $\hat{\mathbf{l}}$ analogno kao na impuls:*

$$\hat{\mathcal{I}}_v \, \hat{\mathbf{l}} \, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{\mathbf{l}}, \tag{8.2.8}$$

a sa svakom rotacijom u $\mathcal{H}_o$ komutira:

$$[\, \hat{\mathcal{I}}_v, \hat{U}(\varphi \mathbf{u}) \,] = 0, \quad \forall \varphi \mathbf{u} \in \pi - \text{sfera}. \tag{8.2.9}$$

Dokaz: Relacija (8.2.8) je neposredna posledica definicije $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ i delovanja $\hat{\mathcal{I}}_v$ na $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ (8.2.4). A (8.2.9) sledi iz antilinearnosti operatora $\hat{\mathcal{I}}_v$ i funkcionalne zavisnosti $\hat{U}(\varphi \mathbf{u})$ od $\hat{\mathbf{l}}$ i iz (8.2.8):

$$\hat{\mathcal{I}}_v \, \hat{U}(\varphi \mathbf{u}) \, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} -[\frac{(\hat{\mathcal{I}}_v \, \imath \, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1}) \, \varphi}{\hbar}]^n \, \frac{1}{n!} \, [\mathbf{u} \cdot (\hat{\mathcal{I}}_v \, \hat{\mathbf{l}} \, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1})]^n = \hat{U}(\varphi \mathbf{u}).$$

Q. E. D.

8.2.2 Da li je inverzija vremena opservabla ?

Operator $\hat{\mathcal{I}}_v$ je antiunitaran, prema tome $\hat{\mathcal{I}}_v^{\dagger} = \hat{\mathcal{I}}_v^{-1}$. S druge strane, on je involucija $\hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = \hat{\mathcal{I}}_v$. To zajedno daje $\hat{\mathcal{I}}_v^{\dagger} = \hat{\mathcal{I}}_v$. Dakle, $\hat{\mathcal{I}}_v$ je hermitski operator kao i $\hat{\mathcal{I}}_p$, doduše antilinearan. Stoga se postavlja pitanje iz naslova ovog paragrafa.

Iz (8.2.6) se vidi da za svaku realnu funkciju $\psi(\mathbf{r})$ (takvu da $\int |\psi(\mathbf{r})|^2 \, \mathrm{d}\mathbf{r} < \infty$) vektor $|\, \psi \,\rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{r} \, \psi(\mathbf{r}) \,|\, \mathbf{r} \,\rangle$ je svojstveni vektor od $\hat{\mathcal{I}}_v$ i odgovara svojstvenoj vrednosti 1. A čisto imaginarne analogne funkcije $\psi(\mathbf{r})$, kao što takođe sledi iz (8.2.6), definišu svojstvene vektore koji odgovaraju svojstvenoj vrednosti -1. Pitamo se da li se ove svojstvene vrednosti mogu, u principu, ostvariti merenjem.

Teorem 8.2.3 *Antilinearan operator, čak i kad je hermitski, nije opservabla i njegove svojstvene vrednosti se ne mogu merenjem realizovati.*

Dokaz: Neka je $\hat{A}_a$ antilinearan operator (na primer hermitski) i neka su realan broj b i vektor $|\, \psi \,\rangle$ rešenja svojstvene jednakosti $\hat{A}_a \,|\, \psi \,\rangle = b \,|\, \psi \,\rangle$. Zamenimo $|\, \psi \,\rangle$ sa $e^{\imath\lambda} \,|\, \psi \,\rangle$:

$$\hat{A}_a \, (e^{\imath\lambda} \,|\, \psi \,\rangle) = e^{-\imath\lambda} \, \hat{A}_a \,|\, \psi \,\rangle = e^{-\imath\lambda} \, b \,|\, \psi \,\rangle = b \, e^{-2\imath\lambda} \, (e^{\imath\lambda} \,|\, \psi \,\rangle).$$

Dakle, pravcu u $\mathcal{H}$ kome pripada $|\, \psi \,\rangle$ odgovara ne jedna svojstvena vrednost, već ceo krug (poluprečnika b) u kompleksnoj ravni. Podsetimo se da *Postulat o stanjima* zahteva da svi vektori koji pripadaju istom pravcu imaju isti fizički smisao (homogenog kvantnog ansambla). Podsetimo se takođe da svojstveni vektor koji odgovara svojstvenoj vrednosti b znači da odgovarajući ansambl ima oštru vrednost b ili, prema *Postulatu o pojedinačnim kvantnim sistemima*, onda svaki sistem u ansamblu ima vrednost b. Kvantna mehanika nema načina da razdvaja vektore unutar jednog pravca u $\mathcal{H}$, a vrednost određenog merenja može biti samo jedan broj, nikako krug u kompleksnoj ravni. Zato antilinearni operatori nisu opservable i njihove svojstvene vrednosti se ne mogu ostvariti merenjem[8.2.1].

Dakle, $\hat{\mathcal{I}}_v$ je samo diskretna transformacija, a ne i opservabla. *Q. E. D.*

[8.2.1] U stvari, za $\hat{\mathcal{I}}_v$, kao i za svaku antiunitarnu involuciju u kompleksnom prostoru $\mathcal{H}_o$ postoje podskupovi koji su realni svojstveni potprostori koji odgovaraju svojstvenim vrednostima 1 i -1 i oba ova potprostora su istog broja dimenzija kao ceo kompleksni prostor stanja $\mathcal{H}_o$. Operator $\hat{\mathcal{I}}_v$ "razlaže" $\mathcal{H}_o$ na "zbir" dva realna prostora u istom smislu kao što kompleksna konjugacija razlaže kompleksnu ravan na realnu i na imaginarnu osu. Inverzni algoritam, tzv. kompleksifikacija, prelazi sa realnog prostora na nadskup koji je jednakodimenzionalni kompleksni prostor, i to (pošto je nejednoznačno) uz fiksiranje jedne od beskonačno mnogo mogućih antilinearnih involucija.

8.2.3 Vremenska inverzija u koordinatnoj i impulsnoj reprezentaciji

Iz (8.2.6) je očigledno da $\hat{\mathcal{I}}_v$ u *koordinatnoj reprezentaciji*, tj. u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$, deluje na sledeći način

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v\,\psi(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r})}. \tag{8.2.10}$$

Zadatak 8.2.4 Izvesti (8.2.10) iz Teorema T 2.7.2.

Zbog (8.2.7), analogon jednakosti (8.2.6) za *impulsnu reprezentaciju* glasi

$$\hat{\mathcal{I}}_v \mid \varphi\,\rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{p}\,\varphi^*(-\mathbf{p}) \mid \mathbf{p}\,\rangle, \tag{8.2.11}$$

za svaki $\mid \varphi\,\rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{p}\,\varphi(\mathbf{p}) \mid \mathbf{p}\,\rangle \in \mathcal{H}_o$.

Zadatak 8.2.5 Dokazati (8.2.11).

Iz (8.2.11) se vidi da u $\mathcal{L}^2(\mathbf{p})$ operator $\hat{\mathcal{I}}_v$ ima sledeće dejstvo:

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v\,\varphi(\mathbf{p}) = \varphi^*(-\mathbf{p})}. \tag{8.2.12}$$

Zadatak 8.2.6 Izračunati (8.2.12) iz opšte transformacione formule (2.7.40c) primenjujući je na transformisanje iz koordinatne u impulsnu reprezentaciju.

8.2.4 Inverzija vremena u uglovnom prostoru i sferni harmonici

U vezi sa faktorizacijom

$$\mathcal{H}_o = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_\theta \otimes \mathcal{H}_\varphi \tag{8.2.13}$$

(uporediti § 6.6.6) možemo se upitati da li i $\hat{\mathcal{I}}_v$ deluje netrivijalno samo u uglovnom prostoru $\mathcal{H}_\Omega \overset{\text{def}}{=} \mathcal{H}_\theta \otimes \mathcal{H}_\varphi$.

Zadatak 8.2.7 Pokazati da pokušaj da se definiše direktni proizvod linearnog operatora $\hat{A}$ i antilinearnog operatora $\hat{A}_a$, tj. $\hat{A} \otimes \hat{A}_a$ (deluje u nekom $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$) kao operator na može da uspe jer:

(i) nije ni linearan ni antilinearan operator,

(ii) daje više nego jedan lik (nije jednoznačno preslikavanje).

Kao što sledi iz zadatka Z 8.2.7, što se tiče eventualne direktne faktorizacije operatora $\hat{\mathcal{I}}_v$, dolazi u obzir *samo faktorizacija na isključivo antilinearne faktor operatore.* Prema tome, ni u jednom faktor prostoru $\hat{\mathcal{I}}_v$ ne može delovati trivijalno (ne postoji jedinični antilinearan operator, kao $\hat{I}$ za linearne operatore).

Lema 8.2.1 *U pogledu faktorizacije orbitnog prostora $\mathcal{H}_o$ (8.2.13) i operator vremenske inverzije $\hat{\mathcal{I}}_v$ se faktoriše*

$$\hat{\mathcal{I}}_v = \hat{\mathcal{I}}_r^{(v)} \otimes \hat{\mathcal{I}}_\theta^{(v)} \otimes \hat{\mathcal{I}}_\varphi^{(v)}, \tag{8.2.14}$$

pri čemu su faktori definisani kao antilinearni operatori sa sledećim delovanjem na vektore sferno-polarnog koordinatnog bazisa $\{| r \rangle | \theta \rangle | \varphi \rangle \mid \forall r, \theta, \varphi\}$:

$$\hat{\mathcal{I}}_r^{(v)} \mid r \rangle = \mid r \rangle, \quad 0 \leq r < \infty; \; \hat{\mathcal{I}}_\theta^{(v)} \mid \theta \rangle = \mid \theta \rangle, \quad 0 \leq \theta \leq \pi; \tag{8.2.15a,b}$$

$$\hat{\mathcal{I}}_\varphi^{(v)} \mid \varphi \rangle = \mid \varphi \rangle, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi. \tag{8.2.15c}$$

Dokaz: Pođimo od (8.2.15) i pomoću njih definišimo antilinearne faktor operatore. Ako desnu stranu od (8.2.14) primenimo na vektore bazisa $\{| \mathbf{r} \rangle \mid \forall \mathbf{r}\}$ u $\mathcal{H}_o$ i uzmemo u obzir jednakost $| \mathbf{r} \rangle = | r \rangle | \theta \rangle | \varphi \rangle$, onda zbog (8.2.5) važi jednakost (8.2.14). *Q. E. D.*

Zadatak 8.2.8 Pokazati da su analogoni od (8.2.14) i (8.2.15) što se tiče operatora $\hat{\mathcal{I}}_p$ jednakosti

$$\hat{\mathcal{I}}_p = \hat{\mathcal{I}}_r^{(p)} \otimes \hat{\mathcal{I}}_\theta^{(p)} \otimes \hat{\mathcal{I}}_\varphi^{(p)}, \tag{8.2.14}$$

$$\hat{\mathcal{I}}_r^{(p)} \mid r \rangle = \mid r \rangle, \; 0 \leq r < \infty; \quad \hat{\mathcal{I}}_\theta^{(p)} \mid \theta \rangle = \mid \pi - \theta \rangle, \; 0 \leq \theta \leq \pi; \quad \hat{\mathcal{I}}_\varphi^{(p)} \mid \varphi \rangle = \begin{cases} \mid \varphi + \pi \rangle, & \text{za } 0 \leq \varphi < \pi \\ \mid \varphi - \pi \rangle, & \text{za } \pi \leq \varphi < 2\pi. \end{cases} \tag{8.2.15d,e,f}$$

Kao i u slučaju $\hat{\mathcal{I}}_p$, ni za $\hat{\mathcal{I}}_v$ nećemo uvek indeksom isticati u kom smo faktor prostoru.

Za nas je od interesa kako deluje $\hat{\mathcal{I}}_v$ u uglovnom faktor prostoru $\mathcal{H}_\Omega$, gde $\mathbf{l}$ deluje netrivijalno i definiše standardni bazis $\{| \, lm \rangle \mid m = -l, \ldots, l; \; l = 0, 1, \ldots\}$. Ovi vektori prelaze u sferne harmonike u sferno-polarnoj koordinatnoj reprezentaciji:

$$\langle \theta \mid \langle \varphi \mid lm \rangle = Y_l^m(\theta, \varphi), \quad \forall l, m. \tag{8.2.16}$$

Neka je $| \chi \rangle = \int_0^\pi \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \, \chi(\theta, \varphi) \mid \theta \rangle \mid \varphi \rangle \in \mathcal{H}_\Omega$ proizvoljan vektor, onda iz (8.2.15) sledi

$$\hat{\mathcal{I}}_v \mid \chi \rangle = \int_0^\pi \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \, \chi^*(\theta, \varphi) \mid \theta \rangle \mid \varphi \rangle. \tag{8.2.17}$$

Iz (8.2.17) neposredno sledi

Lema 8.2.2 *Kada sa apstraktnog uglovnog prostora $\mathcal{H}_\Omega$ pređemo na $\mathcal{L}^2(\Omega)$, onda se $\hat{\mathcal{I}}_v$ reprezentuje kompleksnom konjugacijom, tj. (pišući nepromenjeno) važi*

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v \, \chi(\theta, \varphi) = \chi^*(\theta, \varphi), \quad \forall \chi(\theta, \varphi) \in \mathcal{L}^2(\Omega)}. \tag{8.2.18}$$

Sad možemo dokazati

Teorem 8.2.4 *Operator vremenske inverzije $\hat{\mathcal{I}}_v$ deluje na sferne harmonike na sledeći način:*

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v \, Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \, Y_l^{-m}(\theta, \varphi), \quad \forall l, m}. \tag{8.2.19}$$

Dokaz: Ako pogledamo definiciju funkcija $Y_l^m(\theta, \varphi)$ ((6.6.7) i ispod toga kao i (6.6.4a)-(6.6.5a)) vidimo da kompleksna konjugacija u stvari zamenjuje m sa $-m$. Faktor $(-1)^m$ u (8.2.19) potiče od razlike u faznim faktorima sfernih harmonika za $m \geq 0$ i za $m < 0$ (ova razlika se sastoji od $(-1)^m$, pa je kompenzujemo istim faktorom). *Q. E. D.*

8.2.5 Konstrukcija operatora inverzije vremena u spinskom prostoru

Neka je $\mathcal{H}_s$ spinski faktor prostor čestice. Ograničićemo se na $s = \frac{1}{2}$, tj. na slučaj elektrona, nukleona itd.

Osnovni skup opservabli u $\mathcal{H}_s$ je $\hat{\mathbf{s}}$. Ova vektorska opservabla je po svom fizičkom smislu uglovni moment, a to između ostalog znači da se $\hat{\mathbf{s}}$ odnosi prema operatoru vremenske inverzije u $\mathcal{H}_s$, koji ćemo označiti sa $\hat{\mathcal{I}}_s^{(v)}$, kao što se $\hat{\mathbf{l}}$ odnosi prema $\hat{\mathcal{I}}_o^{(v)}$, operatoru vremenske inverzije u $\mathcal{H}_o$.

Ovo zapažanje će nam poslužiti kao prvi deo definicije za $\hat{\mathcal{I}}_s^{(v)}$. Drugi deo definicije za $\hat{\mathcal{I}}_s^{(v)}$ sastoji se u tome da i ovaj faktor operator mora biti *antilinearan.*

Dakle, $\hat{\mathcal{I}}_s^{(v)}$ u $\mathcal{H}_s$ (izostavljajući simbolični indeks) mora biti antilinearan operator za koji važi

$$\hat{\mathcal{I}}_v \, \hat{\mathbf{s}} \, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{\mathbf{s}}, \tag{8.2.20}$$

kao što vidimo iz (8.2.8).

Reprezentujmo (8.2.20) u standardnom bazisu za $\hat{\mathbf{s}}$ i pređimo na Pauli-jeve matrice. Onda, obeležavajući sa $\mathcal{I}_v = XK$ antilinearnu matricu koja reprezentuje $\hat{\mathcal{I}}_v$ (X je matrica, a K je operacija kompleksne konjugacije, uporediti Teorem T 2.7.1), (8.2.20) prelazi u ekvivalentnu relaciju

$$(XK)\,\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}\,(XK) = 0. \tag{8.2.21}$$

Zadatak 8.2.9 Pokazati da

(i) antilinearna matrica $\sigma_y K$ antikomutira sa $\boldsymbol{\sigma}$,

(ii) ako neka antilinearna matrica XK antikomutira sa $\boldsymbol{\sigma}$, onda nužno ima vid $\lambda\sigma_y K$, gde je λ kompleksan broj.

Preostaje nam samo da odaberemo λ i prepišemo rezultat u obliku operatora. Obeležimo sa $\hat{K}_a$ antilinearan operator koji se u standardnom bazisu za $\hat{\mathbf{s}}$ reprezentuje sa K, tj. takav da

$$\hat{K}_a \mid + \rangle = \mid + \rangle, \quad \hat{K}_a \mid - \rangle = \mid - \rangle. \tag{8.2.22}$$

Operator vremenske inverzije u $\mathcal{H}_s$ onda pišemo u vidu

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v = \hat{Y}_s \, \hat{K}_a \stackrel{\text{def}}{=} \imath \hat{\sigma}_y \hat{K}_a}, \tag{8.2.23}$$

gde je $\hat{Y}_s \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}_s(\pi \mathbf{y}_0)$, kao što se vidi iz (6.10.18)-(6.10.19) (po konvenciji se gornje λ bira baš tako da se u (8.2.23) pojavi $\hat{Y}_s$).

Izvešćemo sad neke osnovne osobine operatora $\hat{I}_v$ u $\mathcal{H}_s$.

Korolar 8.2.2 *Operator $\hat{\mathcal{I}}_v$ u $\mathcal{H}_s$ je kosoinvolutivan, tj.*

$$\hat{\mathcal{I}}_v^2 = -\hat{I}_s \Leftrightarrow \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{\mathcal{I}}_v. \tag{8.2.24a,b}$$

Dokaz: Kvadrat od $\hat{\mathcal{I}}_v$ ćemo lako izračunati na osnovu (8.2.23) i to u reprezentaciji standardnog bazisa: $\hat{\mathcal{I}}_v^2 = \imath\hat{\sigma}_y K(\imath\hat{\sigma}_y K) = -\sigma_y^2 = -I_s$ (iskoristili smo činjenicu da K konjuguje sve na desno, da je σ_y čisto imaginarna matrica i da važi $K^2 = I_s$, $\sigma_y^2 = I_s$).
Ako bismo pomnožili $\hat{\mathcal{I}}_v$ faznim faktorom $e^{\imath\varphi}$ recimo, onda bismo imali $(e^{\imath\varphi}\hat{\mathcal{I}}_v)(e^{\imath\varphi}\hat{\mathcal{I}}_v) = \hat{\mathcal{I}}_v^2 = -\hat{I}_s$ zbog antilinearnosti operatora $\hat{\mathcal{I}}_v$. Dakle kosoinvolutivnost je nužna (ne može se otkloniti koristeći se slobodom u izboru faznog faktora). *Q. E. D.*

Korolar 8.2.3 *U standardnom bazisu* $\{|-\rangle, |+\rangle\}$ *operator* $\hat{\mathcal{I}}_v$ *se reprezentuje antilinearnom matricom*

$$\hat{\mathcal{I}}_v \mid - \rangle = \mid + \rangle, \quad \hat{\mathcal{I}}_v \mid + \rangle = - \mid - \rangle, \tag{8.2.25a,b}$$

ili kompaktno

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v \mid m_s \rangle = (-1)^{\frac{1}{2}+m_s} \mid -m_s \rangle, \quad m_s = \pm\frac{1}{2}}. \tag{8.2.25c}$$

Dokaz: Prvi iskaz je očigledno tačan, a drugi se može izvesti u reprezentaciji standardnog bazisa:

$$\imath\begin{pmatrix} 0 & -\imath \\ \imath & 0 \end{pmatrix} K \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \imath\begin{pmatrix} -\imath \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\imath\begin{pmatrix} 0 & -\imath \\ \imath & 0 \end{pmatrix} K \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \imath\begin{pmatrix} 0 \\ \imath \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Q. E. D.

8.2.6 Vremenska inverzija u ukupnom prostoru stanja

U $\mathcal{H}_u = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$ ($s = \frac{1}{2}$) operator vremenske inverzije je

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_u^{(v)} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{I}}_o^{(v)} \otimes \hat{\mathcal{I}}_s^{(v)}}. \tag{8.2.26}$$

On je *antilinearna kosa involucija*, jer $\hat{\mathcal{I}}_u^{(v)-1} = \hat{\mathcal{I}}_o^{(v)-1} \otimes \hat{\mathcal{I}}_s^{(v)-1} = \hat{\mathcal{I}}_o^{(v)\dagger} \otimes \hat{\mathcal{I}}_s^{(v)\dagger} = \hat{\mathcal{I}}_u^{(v)\dagger}$ i $\hat{\mathcal{I}}_u^{(v)\dagger} = \hat{\mathcal{I}}_o^{(v)} \otimes (-\hat{\mathcal{I}}_s^{(v)}) = -\hat{\mathcal{I}}_u^{(v)}$.

Osim toga, pišući prosto $\hat{\mathcal{I}}_v$ u $\mathcal{H}_u$,

$$\hat{\mathcal{I}}_v \,\hat{\mathbf{j}}\, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{\mathbf{j}}, \tag{8.2.27}$$

kao što neposredno sledi iz $\hat{\mathcal{I}}_v \,\hat{\mathbf{l}}\, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{\mathbf{l}}$ u $\mathcal{H}_o$ i $\hat{\mathcal{I}}_v \,\hat{\mathbf{s}}\, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{\mathbf{s}}$ u $\mathcal{H}_s$.

8.2.7 Inverzija vremena za višečestični sistem

U ukupnom prostoru stanja višečestičnog sistema $\mathcal{H}_{1\ldots N}^{(u)} = \mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$, gde je $\mathcal{H}_i^{(u)}$ ukupni prostor stanja i-te čestice, $i = 1, \ldots, N$, operator vremenske inverzije $\hat{\mathcal{I}}_v$ je direktni proizvod operatora vremenske inverzije za pojedine čestice u sistemu. Operator $\hat{\mathcal{I}}_v$ je kosa involucija ili involucija, prema tome da li sistem sadrži neparan ili paran broj čestica (sve su, po pretpostavci, spina $s = \frac{1}{2}$). Ovaj iskaz može da se izrazi jednakošću

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v^2 = (-1)^{2J}}, \tag{8.2.28}$$

gde je J kvantni broj ukupnog uglovnog momenta sistema, koji je poluceo ili ceo, prema tome da li je broj čestica neparan ili paran (uporediti Teorem T 7.1.3).

Pošto je $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N} = \oplus_J \mathcal{V}_J$, a $(-1)^{2J}$ je zbog superselekcionog pravila celobrojnosti (§ 7.5) jedan te isti broj u svakom od potprostora $\mathcal{V}_J$, ovaj broj u stvari deluje u celom prostoru $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$.

Lako se vidi da opet važi

$$\hat{\mathcal{I}}_v\,\hat{\mathbf{J}}\,\hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{\mathbf{J}}, \tag{8.2.29}$$

gde je $\hat{\mathbf{J}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{j}}_i$ vektorski operator ukupnog uglovnog momenta sistema.

Zadatak 8.2.10 Neka je $\hat{A}$ opservabla u $\mathcal{H}$ koja komutira sa $\hat{\mathcal{I}}_v$. Pokazati da se antilinearni operator $\hat{\mathcal{I}}_v$ redukuje u svakom svojstvenom potprostoru od $\hat{A}$.

Zadatak 8.2.11 Neka je $\hat{B}$ opservabla u $\mathcal{H}$ koja antikomutira sa $\hat{\mathcal{I}}_v$, tj. za koju važi $[\,\hat{B}, \hat{\mathcal{I}}_v\,]_+ \stackrel{\text{def}}{=} \hat{B}\,\hat{\mathcal{I}}_v + \hat{\mathcal{I}}_v\,\hat{B} = 0$. Pokazati da antilinearni operator $\hat{\mathcal{I}}_v$ preslikava svojstveni potprostor $\mathcal{V}_b$ od $\hat{B}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti b u svojstveni potprostor $\mathcal{V}_{-b}$ od $\hat{B}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti $-b$. Pokazati takođe da iz antiunitarnosti operatora $\hat{\mathcal{I}}_v$ sledi

$$\dim \mathcal{V}_b = \dim \mathcal{V}_{-b}, \quad \text{za } b \neq 0. \tag{8.2.30}$$

Jednakost (8.2.29) povlači $[\ \hat{\mathcal{I}}_v, \hat{\mathbf{J}}^2\ ] = 0$, a iz iskaza Zadatka Z 8.2.10 onda sledi da se $\hat{\mathcal{I}}_v$ redukuje u svakom višestrukom ireducibilnom potprostoru $\mathcal{V}_J$ za J. Ako se dodatna opservabla $\hat{A}$ odabere tako da $[\ \hat{\mathcal{I}}_v, \hat{A}\ ] = 0$, onda se $\hat{\mathcal{I}}_v$ redukuje u svakom potprostoru $\mathcal{V}_{J\lambda}$ (tj. u svakoj "koloni" na dijagramu "ormar sa fiokama" za $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{J}}$, uporediti Crtež C 6.2). Iz Zadatka Z 8.2.10 i (8.2.29) sledi da $\hat{\mathcal{I}}_v$ stoga preslikava pravac (tj. kvadratić) koji odgovara M na pravac (kvadratić) koji odgovara $-M$.

Ovo rezonovanje, naravno, važi i u slučaju jedne čestice. Tu, kao što smo videli (Crtež C 7.7), $\hat{\mathbf{l}}^2$ igra ulogu dodatne opservable u odnosu na $\hat{\mathbf{j}}$, a on komutira sa $\hat{\mathcal{I}}_v$.

8.2.8 Operator vremenske inverzije i realnost Clebsch-Gordan-ovih koeficijenata

Videli smo na primerima $\hat{\mathbf{l}}$, $\hat{\mathbf{s}}$, $\hat{\mathbf{j}}$ i $\hat{\mathbf{J}}$ da operator vremenske inverzije $\hat{\mathcal{I}}_v$ antikomutira sa vektorskim operatorom uglovnog momenta. (Ovo je sastavni deo fizičkog pojma uglovnog momenta.)

Vratimo se na teoriju opšteg uglovnog momenta, tj. na kvantni podsistem sa uglovnim momentom $\hat{\mathbf{K}}$ u $\mathcal{H}$. Na osnovu gornjeg, imamo *antikomutiranje*:

$$\hat{\mathcal{I}}_v\,\hat{\mathbf{K}}\,\hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{\mathbf{K}} \iff [\ \hat{\mathcal{I}}_v, \hat{\mathbf{K}}\ ]_+ = 0. \tag{8.2.31a,b}$$

Za nas je važan neposredni korolar

$$\hat{\mathcal{I}}_v\,\hat{\mathbf{K}}^2\,\hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = \hat{\mathbf{K}}^2 \iff [\ \hat{\mathcal{I}}_v, \hat{\mathbf{K}}^2\ ] = 0. \tag{8.2.32a,b}$$

I, naravno, moramo biti svesni da je $\hat{\mathcal{I}}_v$ *antiunitaran* operator u $\mathcal{H}$.

Neka je

$$\hat{Y} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}(\pi\mathbf{y}_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{K}_y} \tag{8.2.33}$$

operator rotacije oko y ose za ugao π.

Lema 8.2.3 *Unitarni operator $\hat{Y}$ komutira sa $\hat{\mathbf{K}}^2$, a antikomutira sa $\hat{K}_z$ (baš kao i antiunitarni operator $\hat{\mathcal{I}}_v$):*

$$[\,\hat{Y}, \hat{\mathbf{K}}^2\,] = 0, \quad [\,\hat{Y}, \hat{K}_z\,]_+ = 0. \tag{8.2.34a,b}$$

Dokaz: Znamo da $[\,\hat{\mathbf{K}}^2, \hat{K}_q\,] = 0$, $q = x, y, z$, $\Rightarrow$ $[\,\hat{\mathbf{K}}^2, \hat{U}(\varphi\mathbf{u})\,] = 0$ $\forall \varphi\mathbf{u} \in \pi -$ sfera, te je prvi deo (8.2.34) dokazan. Uzmimo

$$\hat{Y}\,\hat{K}_z\,\hat{Y}^{-1} = \hat{Y}\,\hat{\mathbf{K}}\cdot\mathbf{z}_0\,\hat{Y}^{-1} = \hat{U}(\pi\mathbf{y}_0)\,\hat{\mathbf{K}}\,\hat{U}^{-1}(\pi\mathbf{y}_0)\cdot\mathbf{z}_0 = (\,\hat{K}_x \quad \hat{K}_y \quad \hat{K}_z\,)\;R(\pi\mathbf{y}_0)\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} = -\hat{K}_z,$$

gde je $R(\pi\mathbf{y}_0)$ matrica 3×3 koja u koordinatnom sistemu $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0\}$ reprezentuje rotaciju $R_{\pi\mathbf{y}_0}$. Znači, iskoristili smo transformacione osobine vektorskog operatora, prepisali smo skalarni proizvod kao matrični proizvod (vrste i kolone) i uzeli u obzir da $R_{\pi\mathbf{y}_0}$ rotira $\mathbf{z}_0$ u $-\mathbf{z}_0$. *Q. E. D.*

Lema 8.2.4 *Operatori $\hat{Y}$ i $\hat{\mathcal{I}}_v$ komutiraju, a njihov proizvod $\hat{Y}\,\hat{\mathcal{I}}_v$ je* antiunitarna involucija.

Dokaz: Usled (8.2.31) i antilinearnosti, $\hat{\mathcal{I}}_v$ komutira sa svakim operatorom rotacije:

$$\hat{\mathcal{I}}_v\,\hat{U}(\varphi\mathbf{u})\,\hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = e^{\frac{\imath}{\hbar}\varphi\mathbf{u}\cdot(-\mathbf{K})} = \hat{U}(\varphi\mathbf{u}),$$

te je prvi iskaz dokazan. Čitalac se može lako uveriti da se unitaran i antiunitaran operator uvek množe u antiunitaran operator.
Najzad, $(\hat{Y}\,\hat{\mathcal{I}}_v)^2 = \hat{Y}^2\,\hat{\mathcal{I}}_v^2 = \hat{U}(2\pi\mathbf{y}_0)\,(-1)^{2K}\,(-1)^{2K}$ je 1 ili -1 u celom $\mathcal{H}$, prema tome da li K uzima cele ili polucele vrednosti u $\mathcal{H}$ (uporediti objašnjenje ispod (8.2.28)). Operator rotacije za 2π (oko bilo koje ose) je takođe 1 ili -1, prema tome da li $\mathcal{H}$ sadrži paran broj (može i nula) ili neparan broj spinskih faktor prostora sa polucelim spinom (pogledati (6.10.17) za $\varphi = 2\pi$). Pošto K uzima cele vrednosti upravo ako i samo ako je pomenuti broj spinskih prostora (tj. broj fermiona) paran, imamo $\hat{U}(2\pi\mathbf{y}_0)\,(-1)^{2K} = 1$. *Q. E. D.*

Lema 8.2.5 *Unitarni operator $\hat{Y}$ komutira sa $\hat{K}_y$, a antikomutira sa $\hat{K}_x$. Osim toga,*

$$\hat{Y}\,\hat{K}_\pm\,\hat{Y}^{-1} = -\hat{K}_\mp. \tag{8.2.35a,b}$$

Dokaz: Komutiranje operatora $\hat{Y} \stackrel{\text{def}}{=} e^{-\frac{\imath}{\hbar}\pi\hat{K}_y}$ sa $\hat{K}_y$ je očigledno. Antikomutiranje sa $\hat{K}_x$ sledi analogno kao antikomutiranje sa $\hat{K}_z$. Relacije (8.2.35) odmah slede iz definicije $\hat{K}_\pm \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_x \pm \imath\hat{K}_y$. *Q. E. D.*

Teorem 8.2.5 *Antiunitarna involucija $\hat{Y}\,\hat{\mathcal{I}}_v$ komutira sa $\hat{\mathbf{K}}^2$, $\hat{K}_z$ i $\hat{K}_\pm$ i redukuje se u svakom zajedničkom svojstvenom potprostoru $\mathcal{V}_{km}$ od $\hat{\mathbf{K}}^2$, i $\hat{K}_z$ i to u uzajamno ekvivalentne operatore za $m = -k, \ldots, k$ ($\forall k$).*

Dokaz: Sa $\hat{\mathbf{K}}^2$ komutiraju $\hat{\mathcal{I}}_v$ i $\hat{Y}$ ponaosob, pa onda i njihov proizvod. Pošto i $\hat{Y}$ i $\hat{\mathcal{I}}_v$ antikomutira sa $\hat{K}_z$, operator $\hat{Y}\hat{\mathcal{I}}_v$ komutira sa $\hat{K}_z$. Iz antikomutiranja (8.2.31) i definicije $\hat{K}_\pm \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_x \pm \imath\hat{K}_y$ odmah sledi

$$\hat{\mathcal{I}}_v\,\hat{K}_\pm\,\hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = -\hat{K}_\mp, \tag{8.2.36a,b}$$

te (8.2.35) i (8.2.36) zajedno iziskuju

$$(\hat{Y}\,\hat{\mathcal{I}}_v)\,\hat{K}_\pm\,(\hat{Y}\,\hat{\mathcal{I}}_v)^{-1} = \hat{K}_\pm. \tag{8.2.37}$$

Redukovanje sledi iz iskaza Zadatka Z 8.2.10. Najzad, ekvivalentnost se dobija neposrednim proširenjem dokaza Teorema T 6.3.2. *Q. E. D.*

Zadatak 8.2.12 Dokazati da se S 6.3.1, zamenjujući "matricu" "antilinearnom matricom" i Teorem T 6.3.2, zamenjujući (6.3.18) sa

$$[\ \hat{A}_a, \hat{K}_z\ ] = 0, \quad [\ \hat{A}_a, \hat{K}_\pm\ ] = 0, \tag{8.2.38a,b}$$

proširuju na antilinearan operator $\hat{A}_a$.

Ako je $\{|\ n\,\rangle \mid \forall n\}$ bazis u $\mathcal{H}$ takav da

$$\hat{A}_a \mid n\,\rangle = \mid n\,\rangle, \quad \forall n, \tag{8.2.39}$$

onda se kaže da je dotični bazis *invarijantan* za antilinearni operator $\hat{A}_a$.

Zadatak 8.2.13 Pokazati da je $\hat{A}_a$ koji ima invarijantan bazis nužno unitaran i involutivan antilinearni operator.

Lema 8.2.6 *Postoji standardan bazis za* $\hat{\mathbf{K}}$ *u* $\mathcal{H}$ *koji je invarijantan za* $\hat{Y}\hat{\mathcal{I}}_v$.

Dokaz: U $\mathcal{V}_{k,m=k}$ biramo dodatnu opservablu $\hat{A}$, koja definiše dodatni kvantni broj λ, a komutira sa $\hat{\mathbf{K}}$, tako da komutira i sa $\hat{Y}\hat{\mathcal{I}}_v$ (lako je uveriti se da to u principu uvek možemo). Onda se $\hat{Y}\hat{\mathcal{I}}_v$ redukuje i u svakom $\mathcal{V}_{k\lambda}$ potprostoru, znači i u svakom preseku $\mathcal{V}_{k,m=k} \cap \mathcal{V}_{k\lambda}$, tj. pravcu (kvadratiću na dijagramu "ormar sa fiokama", Crtež C 6.2). Ako se ispostavi da važi $\hat{Y}\hat{\mathcal{I}}_v \mid km\lambda\rangle = e^{\imath\varphi} \mid km\lambda\rangle$ (ne može opštije zbog redukovanja u kvadratiću), uzimajući po definiciji $\mid km\lambda\,\rangle' \stackrel{\text{def}}{=} e^{\imath\varphi/2} \mid km\lambda\,\rangle$, $\forall\lambda$, kao novi podbazis standardnog bazisa u $\mathcal{V}_{k,m=k}$, dolazimo do $\hat{Y}\hat{\mathcal{I}}_v \mid km\lambda\,\rangle' = \mid km\lambda\,\rangle'$, $\forall\lambda$ (zbog antilinearnosti). Postigavši u $\mathcal{V}_{k,m=k}$ invarijantan standardan podbazis za $\hat{\mathbf{K}}$, to se onda održava i u ostalim potprostorima $\mathcal{V}_{km}$ zbog ekvivalentnosti redukovanih $\hat{Y}\hat{\mathcal{I}}_v$. *Q. E. D.*

Zahvaljujući tome što raspolažemo antiunitarnom involucijom $\hat{Y}\hat{\mathcal{I}}_v$, možemo klasu standardnih bazisa za $\hat{\mathbf{K}}$ u $\mathcal{H}$ suziti na klasu *invarijantnih standardnih bazisa.*

Teorem 8.2.6 *Matrica razvijanja bilo kog invarijantnog standardnog bazisa po bilo kom drugom invarijantnom standardnom bazisu je nužno realna.*

Dokaz: Neka su $\{|\ m\,\rangle \mid \forall m\}$ i $\{|\ m'\,\rangle \mid \forall m'\}$ dva invarijantna bazisa u nekom potprostoru $\mathcal{V}$ i neka $\mid m\,\rangle = \sum_{m'} M_{mm'} \mid m'\,\rangle$. Primenom operatora $\hat{Y}\hat{\mathcal{I}}_v$ sledi $\mid m\,\rangle = \sum_{m'} M^*_{mm'} \mid m'\,\rangle$. Zbog jednoznačnosti razvijanja ove dve jednakosti iziskuju $M_{mm'} = M^*_{mm'}$, $\forall m, m'$. *Q. E. D.*

Priđimo sad zadatku slaganja dva uglovna momenta ($\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}$, $\hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2 = \hat{\mathbf{K}}$) ograničavajući se na invarijantne standardne bazise (7.2.1) i (7.2.2). Iz Teorema T 8.2.6 onda neposredno sledi neobično važan zaključak da su *svi Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti realni.* (Naravno, uslov (7.2.3) nas ne izbacuje iz klase invarijantnih standardnih bazisa u kompozitnom prostoru, jer zahteva pozitivan, znači realan matrični element.)

Zadatak 8.2.14 Pokazati da u uglovnom prostoru $\mathcal{L}^2(\Omega)$ čestice, ako se sfernim harmonicima promeni fazni faktor po preskripciji

$$\mathcal{Y}_l^m(\theta,\varphi) \stackrel{\text{def}}{=} \imath^l Y_l^m(\theta,\varphi), \quad \forall l, m, \tag{8.2.40}$$

onda $\mathcal{Y}_l^m(\theta,\varphi)$ čine invarijantan standardni bazis.

Zadatak 8.2.15 Pokazati da u $\mathcal{L}^2(\Omega)$ važi

$$\hat{\mathcal{I}}_v \mathcal{Y}_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^{l+m} \mathcal{Y}_l^{-m}(\theta,\varphi), \quad \forall l, m. \tag{8.2.41}$$

Zadatak 8.2.16 Pokazati da u proizvoljnom prostoru $\mathcal{H}$ sa $\hat{\mathbf{K}}$ važi

$$\hat{\mathcal{I}}_v \mid kml\,\rangle = (-1)^{k+m} \mid k, -m, \lambda\,\rangle, \quad \forall k, m, \tag{8.2.42}$$

ako se pri izgradnji standardnog bazisa u (eventualno) kompozitnom prostoru $\mathcal{H}$ u uglovnim faktor prostorima čestica uvek ograničimo na invarijantan standardni bazis (8.2.40). (Indikacija: Poći od spinskog faktor prostora jedne čestice — uporediti (8.2.25*c*) — a zatim pokazati održanje (8.2.42) pri sabiranju dva uglovna momenta.)

8.3 Grupa simetrije zakona kretanja i hamiltonijana

U celokupnom našem dosadašnjem proučavanju simetrija ograničili smo se na kinematička razmatranja, tj. nismo relirali simetrije sa zakonom kretanja i hamiltonijanom. Ovome, bez sumnje najvažnijem, zadatku teorije kvantno-mehaničkih simetrija posvećen je ovaj odeljak.

Prodiskutovaćemo Galilejev princip invarijantnosti i ulogu diskretnih simetrija u kvantnoj fizici. Simetriju zakona kretanja uvešćemo u striktnijoj i opštijoj "opservabilnoj" formi, pa ćemo je suziti na njen "formalni" vid, koji je u najužoj vezi sa simetrijom hamiltonijana. Objasnićemo u primenama mnogo korišćene pojmove dobrih kvantnih brojeva i selekcionih pravila (u tačnom i približnom važenju). Na kraju, detaljno ćemo proanalizirati primenu geometrije (višestrukih ireducibilnih invarijantnih potprostora) grupe simetrije hamiltonijana na klasifikaciju energetskih nivoa.

8.3.1 Opservabilna invarijantnost zakona kretanja pod grupom simetrije

Pri proučavanju uloge operatora simetrije u dinamici kvantnog sistema, poći ćemo od *verovatnoće prelaza* u kasnijem trenutku:

$$v_{i\to f}(t) = |\langle \varphi_f \mid \hat{U}(t-t_0,t_0) \mid \psi_i \rangle|^2 \tag{8.3.1}$$

(i i f od reči početni i krajnji na engleskom[8.3.1].) Imali smo objašnjenje ovog pojma u § 3.3.4.

Izraz (8.3.1) je neophodan za određivanje operatora simetrije zakona kretanja kao što je verovatnoća prelaza u istom trenutku (pojam koji smo uveli u § 2.4.7) bio u § 5.2.1 deo definicije operatora simetrije u kinematičkom smislu.

Zadatak 8.3.1 * Neka je selektivno merenje u trenutku t nekompletno, znači umesto da definiše određeno stanje (kao $\mid \varphi_f \rangle$ u kompletnom merenju u (8.3.1)), definiše jedan svojstveni potprostor na koji projektuje, recimo, projektor $\hat{P}_f$. Pokazati da se onda umesto (8.3.1) piše:

$$v_{i\to f}(t) = |\langle \psi_i \mid \hat{U}^\dagger(t-t_0,t_0)\hat{P}_f\hat{U}(t-t_0,t_0) \mid \psi_i \rangle|^2, \tag{8.3.2}$$

i da je to uopštenje od (8.3.1).

Zadatak 8.3.2 * Neka je početna preparacija nekompletna, tj. umesto čistog stanja $\mid \psi_i \rangle$ neka daje određeno mešano stanje $\hat{\rho}_i$. Pokazati da se (8.3.1) onda zamenjuje sa

$$v_{i\to f}(t) = |\langle \varphi_f \mid \hat{U}(t-t_0,t_0)\hat{\rho}_i\hat{U}(t-t_0,t_0)^\dagger \mid \varphi_f \rangle|^2, \tag{8.3.3}$$

i da je to uopštenje (8.3.1).

Zadatak 8.3.3 * Neka su i početna preparacija i krajnje merenje nekompletno, tj. umesto $\mid \psi_i \rangle$ i $\mid \varphi_f \rangle$ imamo $\hat{\rho}_i$ i $\hat{P}_f$. Pokazati da u tom slučaju verovatnoća prelaza glasi

$$v_{i\to f}(t) = \mathrm{Tr}\, \hat{P}_f\hat{U}(t-t_0,t_0)\hat{\rho}_i\hat{U}(t-t_0,t_0)^\dagger, \tag{8.3.4}$$

i da je to uopštenje u odnosu na sve tri prethodne formule za $v_{i\to f}$.

[8.3.1] *initial*, čitati inišl, početni, odnosno *final*, čitati fajnal, krajnji.

Neka je $\{\hat{U}(g) \mid g \in G\}$ određena grupa (kinematička) simetrije, tj. grupa unitarnih i antiunitarnih operatora koja u prostoru stanja $\mathcal{H}$ reprezentuje neku grupu G (definisanu u klasičnom faznom prostoru ili u kvantnom unutrašnjem faktor prostoru). Smatra se da je *zakon kretanja opservabilno invarijantan pod* pomenutom grupom, ako se verovatnoća prelaza (8.3.1) ne menja pri primeni pojedinih operatora iz G istovremeno na početno i krajnje stanje, tj. ako važi:

$$\boxed{v_{i\to f}(t) = |\langle \varphi_f \mid \hat{U}(t) \mid \psi_i \rangle|^2 = |\langle \varphi_f \mid \hat{U}^\dagger(g)\hat{U}(t)\hat{U}(g) \mid \psi_i \rangle|^2}, \tag{8.3.5}$$

gde je $\hat{U}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}(t-t_0, t_0)$, i to treba da važi za $\forall g \in G$ i $\forall \mid \psi_i \rangle, \mid \varphi_f \rangle \in \mathcal{H}$, $t \geq t_0$.

Zadatak 8.3.4 * Definisati opservabilnu invarijantnost zakona kretanja pod G pomoću (8.3.4) i pokazati da je to ekvivalentna definicija.

Da bismo bolje razumeli *fizički smisao* definicije (8.3.5), pretpostavimo da se radi o podgrupi proširene Galilejeve grupe, tj. o operatorima simetrije koji reprezentuju klasične transformacije. Ovima možemo delovati (fizički ili bar u mislima) na sve uređaje u laboratoriji. Delujući tako sa g na uređaj za početnu preparaciju proizvešćemo umesto $\mid \psi_i \rangle$ stanje $\hat{U}(g) \mid \psi_i \rangle$, a delujući (u trenutku t) istom transformacijom na merni aparat, detektovaćemo umesto $\mid \varphi_f \rangle$ stanje $\hat{U}(g) \mid \varphi_f \rangle$. Relacija (8.3.5) onda zahteva da ne bude razlike u relativnoj frekvenci primenili mi na taj način g ili ne.

8.3.2 Galilejev princip invarijantnosti

Kao što se mnogi osnovni principi klasične mehanike prenose u kvantnu mehaniku, prenosi se i princip u naslovu ovog paragrafa (uporediti § 5.1.7). Po njemu svaki unitarni operator koji reprezentuje transformaciju iz Galilejeve grupe *a priori* zadovoljava i (8.3.5), tj. predstavlja transformaciju simetrije pod čijim je dejstvom zakon kretanja opservabilno invarijantan.

Pažljivi čitalac je zapazio da dok u klasičnoj mehanici važi opšti Galilejev princip invarijantnosti (koji se odnosi na proširenu Galilejevu grupu $\overline{\mathcal{G}}$), u kvantnoj mehanici imamo samo Galilejev princip. Naime, ispostavilo se da diskretne transformacije simetrije nisu univerzalne *a priori* simetrije u kvantnoj fizici. U sledećem paragrafu proučićemo podrobnije narušavanje simetrije inverzije prostora u slaboj interakciji. U paragrafu § 8.3.4 ćemo nešto više reći o narušavanju simetrije inverzije vremena.

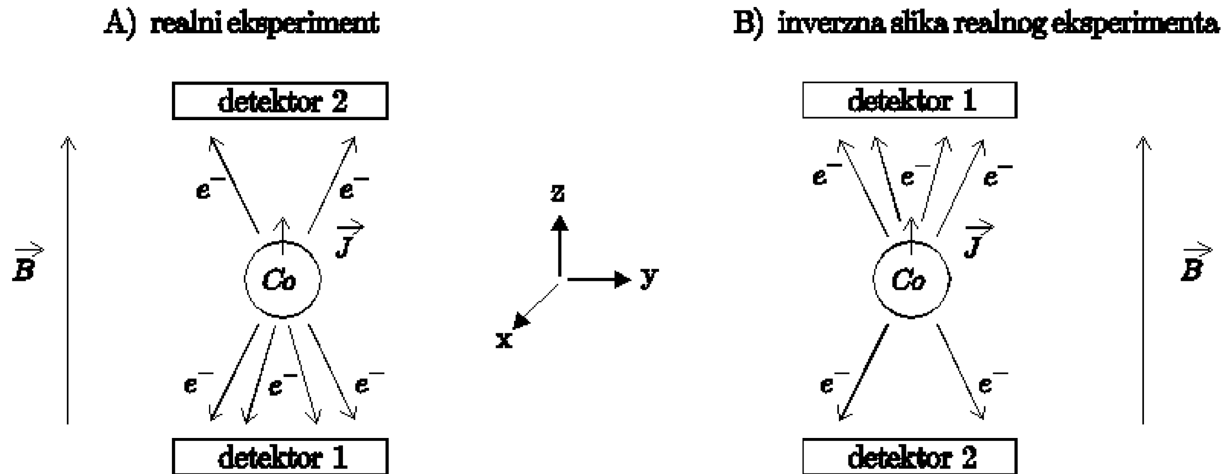
Galilejeva grupa $\mathcal{G}$ nije najšira grupa iz čije se reprezentacije u prostoru stanja regrutuju operatori koji ostavljaju zakon kretanja invarijantnim. U odeljcima § 8.3.5 i § 8.3.6 upoznaćemo se sa unutrašnjim simetrijama hadrona (teških elementarnih čestica). One nemaju klasičnog analogona.

8.3.3 * Eksperiment Wu i saradnika o narušavanju simetrije prostorne inverzije u slaboj interakciji

Do 1956. godine jednodušno se verovalo da se Galilejev princip invarijantnosti može proširiti na operatore inverzije prostora $\hat{\mathcal{I}}_p$ i inverzije vremena $\hat{\mathcal{I}}_v$, tj. da važi opšti Galilejev princip invarijantnosti. Objasnićemo sada čuveni eksperiment gospođe Wu i saradnika (izvršen krajem

pomenute godine)[8.3.2], koji je kao *experimentum crucis* (odlučujući eksperiment) dokazao teorijsku hipotezu Lee-a i Yang-a[8.3.3] iz iste godine da prostorna inverzija nije *a priori* simetrija za sve interakcije u prirodi. Konkretno, za tzv. slabu interakciju, koja, između ostalog, dovodi do pretvaranja neutrona u proton, elektron (u vidu β-zraka) i u elektronov antineutrino, Lee i Yang su očekivali da narušava simetriju $\hat{\mathcal{I}}_p$ (videti § 8.4.3 niže).

Eksperiment Wu i saradnika sastojao se u sledećem. Jezgra ^{60}Co ohlađena su na oko 0.01 K i podvrgnuta magnetnom polju koje je proizvedeno propuštanjem struje kroz solenoid oko jezgara.



Slika 8.1: **Eksperiment Wu i saradnika**.

Jezgro ^{60}Co ima $J = 5$ i magnetno polje služi za usmeravanje orijentacije jezgara preko interakcije njihovih magnetnih dipola sa spoljašnjim magnetnim poljem. A hlađenje služi minimaliziranju toplotnog kretanja atoma, kako se postignuta paralelna orijentacija ne bi poništila u haotičnom toplotnom kretanju atoma.

Jezgra ^{60}Co emituju β-zrake (elektrone) na račun gore pomenutog pretvaranja neutrona u protone. Merenje njihove tzv. uglovne distribucije, tj. rasporeda po prostornom uglu računatom iz centra jezgra, je neposredni cilj eksperimenta (videti Crtež C 8.1).

Izražavaćemo se na jeziku na kom smo formulisali invarijantnost zakona kretanja. Pre svega, šta je početni uslov? To je ansambl ^{60}Co jezgara ohlađenih i orijentisanih. (Ovde se radi o prostornom ili Boltzmann-ovom ansamblu, jer uzajamni uticaj jezgara unutar zajedničkog makroskopskog volumena je irelevantan.) Vremenska evolucija sastoji se u prepuštanju jezgara njima samima kako bi nestabilnost nuklearne strukture došla do izražaja putem β-zračenja[8.3.4].

Merenje u krajnjem trenutku t utvrđuje odnos broja elektrona koji izleću duž pozitivne z ose (tj. paralelno sa spinom jezgara) i u suprotnom pravcu (antiparalelno). Ispitivana grupa simetrije je u stvari $\{\hat{\mathcal{I}}_p, \hat{I}\} \stackrel{\text{def}}{=} G$.

[8.3.2] Originalna referenca: C. S. Wu et al., *Physical Review* **105**, 1413 (1957).

[8.3.3] Čitati Li i Jang. Originalna referenca: T. D. Lee, C. N. Yang, Physical Review **104**, 254 (1956).

[8.3.4] Hlađenje i magnetno polje se stalno održavaju, jer to ionako ne može da utiče na pomenuti nuklearni proces, a neophodno je da su jezgra stalno orijentisana jer bismo inače imali izotropnu uglovnu distribuciju zbog *random* (čitati rendm, na engleskom znači slučajan, bez reda) orijentacije jezgara.

Ako izvršimo prostornu inverziju celog eksperimenta (početne preparacije i krajnjeg merenja), tj. pređemo sa Crteža C 8.1 (*a*) na Crtež C 8.1 (*b*) pseudovektori **B** i **J** se ne menjaju, ne menja se ni osnovno stanje neraspadnutog ^{60}Co, jer je u svojstvenom stanju prostorne inverzije. Dakle, ni početni uslov, ni završni merni postupak se ne menjaju pod $\hat{\mathcal{I}}_p$. Međutim, položaji **r** i impulsi **p** β-zraka prelaze u suprotne.

Kao što je očigledno sa Crteža C 8.1, pomenuti mereni odnos broja elektrona koji izleću duž **B** i suprotno od **B** (što je pandan verovatnoće prelaza, samo što merenje nije maksimalno) je isti pre i posle refleksije samo ako je taj odnos 1. Međutim, kao što se vidi na Crtežu C 8.1 (*a*), gde je prikazan realni proces, taj odnos nije jednak 1, antiparalelno sa **B** izleće više β-zraka. Znači, Crtež C 8.1 (*b*) je fiktivan i lažan, prikazuje proces koji ne postoji u prirodi. Prostorna inverzija $\hat{\mathcal{I}}_p$ nije simetrija procesa koji potiče od slabe interakcije, iako za to nema razloga u rasporedu i kretanju materije. Naime, magnetno polje i orijentisanost celog jezgra nemaju uticaja na proces $n \to p + e^- + \overline{\nu}_e$, koji se odvija unutar jezgra.

8.3.4 * Eksperimentalni dokaz narušavanja simetrije vremenske inverzije u slaboj interakciji

U ovom paragrafu ćemo malo izaći van okvira standardne kvantne mehanike (u stvari u fiziku elementarnih čestica) i biće pogodno da privremeno izmenimo našu notaciju: da $\hat{\mathcal{I}}_p$ obeležimo sa P, a $\hat{\mathcal{I}}_v$ sa T.

Uvešćemo i tzv. *konjugaciju naboja* C, koja pretvara česticu u njenu antičesticu[8.3.5]. Operatori P i C su unitarni, a T je antiunitaran.

U tzv. lokalnoj kvantnoj teoriji polja dokazuje se kao teorem da iz relativističke invarijantnosti i lokalnosti teorije (lokalnost je u suštini u negiranju delovanja na daljinu) nužno sledi da su svi zakoni kretanja invarijantni pod operatorom simetrije CPT (tzv. CPT-teorem). Neposredna je posledica ovog teorema da sâm operator vremenske inverzije T ostavlja invarijantnim sve zakone kretanja *ako i samo ako isto važi za* CP.

Posle obaranja samog operatora P kao univerzalne simetrije interakcije, neko vreme se verovalo da CP s jedne strane, a T s druge jesu takve simetrije. Međutim, 1964. godine eksperimentalno je utvrđeno[8.3.6] da se u slaboj interakciji narušava CP, a prema tome i T invarijantnost.

Radi se o raspadu neutralnih K-mezona (ili kaona). Ima ih dva: K^o i $\overline{K}^o$. Ove čestice imaju čudnu osobinu da se raspadaju preko druge dve čestice, K_L i K_S, od kojih su one sledeće superpozicije ako pretpostavimo CP invarijantnost svih interakcija:

$$\mid K^o \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mid K_L \rangle + \imath \mid K_S \rangle), \tag{8.3.6a}$$

$$\mid \overline{K}^o \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mid K_L \rangle - \imath \mid K_S \rangle). \tag{8.3.6b}$$

K_L se naziva dugoživećim kaonom (L od engleske reči *long* — dugačak), njegov srednji život je reda $6\,10^{-8}$ s; K_S je kratkoživeći kaon (S od engleske reči *short* — kratak), čiji je srednji život

[8.3.5] Operator konjugacije naboja (engleski: *charge conjugation*) koji je potpuno stran nerelativističkoj kvantnoj mehanici, izgleda kao ekstra postulat teorije elementarnih čestica. Međutim, u relativističkoj kvantnoj mehanici ovaj operator sasvim prirodno proizilazi iz teorije.

[8.3.6] Originalna referenca: J. H. Christenson et al., *Physical Review Letters* **13**, 138 (1964).

reda 10^{-10} s. Uz pogodni izbor faznih faktora (tako da $CP \mid K^o \rangle = - \mid \overline{K}^o \rangle$), $\mid K_L \rangle$ i $\mid K_S \rangle$ su svojstvena stanja CP operatora (koji je unitaran i involutivan, prema tome i hermitski, tj. opservabla):

$$CP \mid K_L \rangle = - \mid K_L \rangle, \quad CP \mid K_S \rangle = \mid K_S \rangle. \tag{8.3.7a,b}$$

Raspad koji je eksperimentalno detektovan pomenute 1964. godine bio je

$$\boxed{K_L \to \pi^+ + \pi^-}. \tag{8.3.8}$$

I dvo-pionski sistem ima određenu CP parnost, ali ona je 1:

$$CP \mid \pi^+\pi^- \rangle = \mid \pi^+\pi^- \rangle \tag{8.3.9}$$

(koordinatni početak je po konvenciji u centru masa; orbitni faktor od P deluje trivijalno; spinski faktor deluje kao -1 i na π^+ i na π^-, znači sve skupa kao 1; C prevodi π^+ i π^- jedno u drugo).

Dakle, u procesu (8.3.8) CP-parnost se promenila od -1 na 1. Videćemo niže (u § 8.3.8) da se time narušava tzv. selekciono pravilo CP-a, a to ćemo videti da je potreban uslov za invarijantnost interakcije u (8.3.8) pod delovanjem CP.

8.3.5 Formalna invarijantnost zakona kretanja pod grupom simetrije

U ovom paragrafu ćemo našu definiciju (8.3.5) iz § 8.3.1 transformisati u pojam iz naslova, koji je doduše nešto uži, ali daleko pogodniji za kvantno-mehanički formalizam.

Zadatak 8.3.5 Ako su $\hat{A}$ i $\hat{B}$ dva linearna operatora u $\mathcal{H}$ definisana na celom $\mathcal{H}$ i to takva da za njih važi

$$|\langle a \mid \hat{A} \mid b \rangle| = |\langle a \mid \hat{B} \mid b \rangle|, \quad \forall \mid a \rangle, \mid b \rangle \in \mathcal{H}, \tag{8.3.10}$$

pokazati da onda nužno sledi $\hat{A} = e^{\imath\varphi}\, \hat{B}$.

Primenom iskaza Zadatka Z 8.3.5 na (8.3.5) sledi

$$\hat{U}^\dagger(g)\, \hat{U}(t)\, \hat{U}(g) = e^{\imath\varphi(g,t)}\, \hat{U}(t), \quad \forall g \in G, \quad -\infty < t < \infty.$$

Pošto je $\hat{U}^\dagger(g) = \hat{U}^{-1}(g) = \hat{U}(g^{-1})$, prelazeći sa g na g^{-1} kao tekući element u G (i pišući opet g) i koristeći $\lambda(g,t) \stackrel{\text{def}}{=} \varphi(g^{-1},t)$, imamo

$$\hat{U}(g)\, \hat{U}(t)\, \hat{U}^\dagger(g) = e^{\imath\lambda(g,t)}\, \hat{U}(t), \quad \forall g \in G, \quad -\infty < t < \infty. \tag{8.3.11}$$

Zadatak 8.3.6 * Pokazati da iz relacije (8.3.11) sledi:

(*a*) Za arbitreran fiksiran trenutak t, funkcija $e^{\imath\lambda(g,t)}$ predstavlja kontinualni homomorfizam grupe G u multiplikativnu grupu faznih faktora.

(*b*) Za arbitrernu fiksiranu transformaciju $g \in G$, ista funkcija je neprekidni homomorfizam aditivne grupe realnih brojeva (tj. grupa vremenskih translacija) u pomenutu grupu faznih faktora.

Lema 8.3.1 *Ako je G* grupa rotacija R(3), *onda je fazni faktor u (8.3.11) jednak jedinici identički po $g \in G$ i t.*

Dokaz: Dokaz neposredno sledi iz činjenice da homomorfizam iz Zadatka Z 8.3.6 (*a*) očigledno daje ireducibilnu reprezentaciju rotacione grupe i to jednodimenzionalnu. Međutim, znamo iz teorije rotacija u kvantnoj mehanici da postoji samo jedna takva reprezentacija, ona odgovara $k = 0$ i ona je data sa $R_{\varphi \mathbf{u}} \to \hat{I}$. *Q. E. D.*

Lema 8.3.2 *Ako je G* konačna grupa, *onda takođe fazni faktor u (8.3.11) mora biti jednak jedinici identički po $g \in G$ i t.*

Dokaz: Početni uslov evolucionog operatora glasi $\hat{U}(t = 0) = \hat{I}$, te ako u (8.3.11) stavimo $t = 0$, dobićemo

$$e^{\imath\lambda(g,t=0)} = 1, \quad \forall g \in G, \tag{8.3.12}$$

i to za bilo koju grupu G. Kada je G konačna grupa, onda je svaka transformacija g konačnog reda, na primer $g^p = I$, tako da zbog homomorfizma (Zadatak Z 8.3.6 (*a*)) $e^{\imath\lambda(g,t=0)}$ mora biti p-ti koren iz jedinice. Zbog neprekidnosti po t (Zadatak Z 8.3.6 (*b*)) ovaj faktor se sme samo neprekidno menjati. A pošto je promena sa jednog p-tog korena od 1 na drugi skokovita, $e^{\imath\lambda(g,t=0)}$ mora biti isti za sve t. Relacija (8.3.12) onda dovodi do iskaza Leme L 8.3.2. *Q. E. D.*

Napomena: Primer za konačnu grupu simetrije G je, pored ciklusa prostorne inverzije $\{I, \mathcal{I}_p\}$, i permutaciona grupa N čestica (reda $N!$), za svako N. Ovom grupom ćemo se koristiti pri proučavanju sistema identičnih fermiona (kao što je elektronski omotač atoma) u § 9.3-§ 9.5.

Fazni faktor (8.3.11) ne otpada za sve grupe simetrije. Na primer, ako je G translaciona grupa T_3, onda su iskazi (*a*) i (*b*) Zadatka Z 8.3.6 zadovoljeni sa $\lambda(g, t) = (a_x + a_y + a_z)\, t$ na primer, kao što se lako vidi. Zato je u opštem slučaju potrebno razlikovati opservabilnu i formalnu definiciju invarijantnosti.

Po definiciji, o *formalnoj invarijantnosti zakona kretanja* govorimo ako važi (8.3.11) sa $\lambda(g, t) = 0$, $\forall g \in G$, $t > t_0$, tj. ako

$$\hat{U}(g)\, \hat{U}(t)\, \hat{U}(g)^\dagger = \hat{U}(t) \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{[\, \hat{U}(g), \hat{U}(t)\,] = 0}, \quad \forall g, t. \tag{8.3.13a,b}$$

Evidentno je da je opservabilna invarijantnost opštija od formalne, tj. iz formalne sledi opšta ali ne nužno i obratno. Za sâm formalizam kvantne mehanike formalna definicija je od velikog značaja.

8.3.6 Grupa simetrije hamiltonijana

Sad ćemo proučiti definiciju (8.3.13) sa gledišta hamiltonijana konzervativnog kvantnog sistema.

Teorem 8.3.1 *Evolucioni operator $\hat{U}(t)$* konzervativnog *kvantnog sistema je invarijantan pod grupom simetrije G, tj. relacije (8.3.13) važe, ako i samo ako važe jednakosti*

$$\hat{U}(g)\, \hat{H}\, \hat{U}(g)^\dagger = \hat{H} \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{[\, \hat{U}(g), \hat{H}\,] = 0}, \quad \forall g \in G. \tag{8.3.14a,b}$$

Dokaz: Dokaz je specijalni slučaj dokaza poznatog teorema u teoriji Lie-jevih grupa po kome operator komutira sa Lie-vom grupom ako i samo ako komutira sa svim generatorima te grupe (uporediti konkretni primer rotacione grupe u Korolaru K 6.4.3). Za konzervativan sistem $\hat{H}$ ne zavisi od vremena (uporediti Teorem T 3.1.1), a on je

jedini generator (jednoparametarske Lie-jeve) grupe vremenskih evolucija $\{\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}} \mid -\infty < t < +\infty\}$. *Q. E. D.*

Dakle, ako je kvantni sistem konzervativan, formalna definicija invarijantnosti zakona kretanja pod delovanjem grupe simetrije G je ekvivalentna tome da je dotična grupa u stvari *grupa simetrije hamiltonijana* ili, kako se još kaže da je *hamiltonijan invarijantan* pod delovanjem dotične grupe $\{\hat{U}(g) \mid g \in G\}$.

Teorem 8.3.2 *Hamiltonijan kvantnog sistema je invarijantan pod* Lie-jevom grupom simetrije $\{\hat{U}(g) \mid g \in G\}$ *ako i samo ako komutira sa svakim generatorom reprezentacije od* G *u* $\mathcal{H}$. *Drugim rečima, (8.3.14) važi ako i samo ako*

$$\boxed{[\ \hat{A}_p, \hat{H}\ ] = 0}, \quad p = 1, 2, \ldots, P, \tag{8.3.15}$$

gde su $\hat{A}_p$ *(hermitski) generatori* P*-parametarske Lie-jeve grupe simetrije*

$$\{\hat{U}(g) = e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_{p=1}^{P} a_p(g)\hat{A}_p} \mid g \in G\},$$

(a_p *su realni brojevi, Lie-jevi parametri).*

Dokaz: Dokaz je analogan kao za prethodni teorem. *Q. E. D.*

Zakon kretanja u diferencijalnom vidu glasi

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mid \psi(t)\,\rangle = \hat{H} \mid \psi(t)\,\rangle, \tag{8.3.16}$$

sa $\mid \psi(t_0)\,\rangle$ kao početnim uslovom. Ograničimo se na konzervativan sistem. *Invarijantnost zakona kretanja pod* G *u diferencijalnom vidu* sastoji se u tome da iz važenja (8.3.16) sledi važenje jednakosti

$$i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,(\hat{U}(g) \mid \psi(t)\,\rangle) = \hat{H}\,(\hat{U}(g) \mid \psi(t)\,\rangle) \tag{8.3.17}$$

sa početnim uslovom $\hat{U}(g) \mid \psi(t_0)\,\rangle$, za $\forall g \in G$. Drugim rečima, da svaki operator simetrije $\hat{U}(g)$ preslikava jednu moguću trajektoriju u prostoru stanja na drugu moguću trajektoriju.

Rečeno važi za grupu unitarnih operatora $\hat{U}(g)$. Kako se to modifikuje u slučaju antiunitarnih operatora, konkretno operatora $\hat{\mathcal{I}}_v$, videćemo u § 8.4.6.

Zadatak 8.3.7 Pokazati neposredno (tj. bez korišćenja rezultata ovog odeljka) da se upravo izloženi pojam invarijantnosti diferencijalnog vida zakona kretanja podudara sa invarijantnošću evolucionog operatora pod G (tj. sa (8.3.13)).

Zadatak 8.3.8 Pokazati (bez korišćenja rezultata ovog odeljka) da je invarijantnost zakona kretanja u diferencijalnom vidu ekvivalentna invarijantnosti $\hat{H}$ pod G.

8.3.7 Dobri kvantni brojevi i klasifikacija energetskih nivoa

U ovom paragrafu ćemo proanalizirati najvažnije posledice relacije (8.3.14).

Korolar 8.3.1 *Invarijantnost hamiltonijana konzervativnog sistema pod* Lie-jevom grupom $\{\hat{U}(g) \mid g \in G\}$ *ima posledicu da se očekivana vrednost svake opservable* $\hat{A}$ *koja je* polinom *od hermitskih operatora* $\hat{A}_p$, $p = 1, 2, \ldots, P$, *dotične grupe, ne menja u vremenu, tj.*

$$\langle\, \hat{A} \,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi(t) \mid \hat{A} \mid \psi(t) \,\rangle = \langle \psi(t_0) \mid \hat{A} \mid \psi(t_0) \,\rangle. \tag{8.3.18}$$

Dokaz: Pošto svaki $\hat{A}_p$ komutira sa $\hat{H}$ (Teorem T 8.3.2), lako je videti da isto važi i za $\hat{A}$, koji je polinom od $\hat{A}_p$-ova. Onda $\hat{A}$ komutira i sa $\hat{U}(t)$, koji je funkcija od $\hat{H}$, a to povlači $\hat{U}^\dagger(t)\,\hat{A}\,\hat{U}(t) = \hat{A}$. Najzad, $\langle \psi(t) \mid \hat{A} \mid \psi(t) \,\rangle = \langle \psi(t_0) \mid \hat{U}^\dagger(t)\,\hat{A}\,\hat{U}(t) \mid \psi(t_0) \,\rangle = \langle \psi(t_0) \mid \hat{A} \mid \psi(t_0) \,\rangle$. *Q. E. D.*

Naravno, sami hermitski operatori $\hat{A}_p$ su specijalni slučaj pomenute opservable $\hat{A}$, te i za njih važi (8.3.18):

$$\langle\, \hat{A}_p \,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi(t) \mid \hat{A}_p \mid \psi(t) \,\rangle = \langle \psi(t_0) \mid \hat{A}_p \mid \psi(t_0) \,\rangle, \quad p = 1, 2, \ldots, P. \tag{8.3.19}$$

Kao ilustraciju značenja (8.3.18) i (8.3.19), uzmimo slučaj rotaciono simetričnog hamiltonijana, tj. grupu simetrije $\{\hat{U}(\varphi\mathbf{u}) \mid R_{\varphi\mathbf{u}} \in \mathrm{R}(3)\}$ u sadašnjoj notaciji. Relacija (8.3.19) onda znači da je očekivana vrednost svake komponente $\hat{K}_q$, $q = x, y, z$ nepromenjena u toku vremena. Relacija (8.3.18) ima za posledicu da isto važi i za $\hat{\mathbf{K}}^2$.

Korolar 8.3.2 *Ako se neki hermitski operator* $\hat{A}$ *može napisati kao polinom od operatora grupe simetrije hamiltonijana konzervativnog sistema, onda je opservabla* $\hat{A}$ *kompatibilna sa* $\hat{H}$*:*

$$[\, \hat{A}, \hat{H} \,] = 0, \tag{8.3.20a}$$

i njena očekivana vrednost ne zavisi od vremena

$$\langle\, \hat{A} \,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi(t) \mid \hat{A} \mid \psi(t) \,\rangle = \langle \psi(t_0) \mid \hat{A} \mid \psi(t_0) \,\rangle. \tag{8.3.20b}$$

Dokaz: Pošto je $[\, \hat{U}(g), \hat{H} \,] = 0$, $\forall g \in G$, komutiranje sa $\hat{H}$ odmah sledi za svaki proizvod operatorâ $\hat{U}(g)$ i za svaki polinom od njih. Ako je $\hat{A}$ takav polinom, imamo (8.3.20a) i iz toga odmah sledi $[\, \hat{A}, \hat{U}(t) \,] = 0$. A to iziskuje (8.3.20$b$) (kao u dokazu Korolara K 8.3.1). *Q. E. D.*

Treba uočiti da se Korolar K 8.3.1 odnosi samo na Lie-jeve grupe simetrije hamiltonijana, a Korolar K 8.3.2 je primenljiv kako na Lie-jeve, tako i na konačne grupe G.

Korolar 8.3.3 *Neka je* $\hat{A}$ *opservabla koja je polinom ili od samih operatora grupe simetrije hamiltonijana konzervativnog sistema ili od hermitskih generatora* $\hat{A}_p$ *te grupe (ako je Lie-jeva). Ako je početno stanje* $\mid \psi(t_0) \,\rangle$ *sistema svojstveno stanje od* $\hat{A}$ *i odgovara nekoj svojstvenoj vrednosti* a*, onda je i stanje* $\mid \psi(t) \,\rangle$ *u svakom kasnijem trenutku svojstveno stanje od* $\hat{A}$ *i odgovara istoj svojstvenoj vrednosti* a.

Dokaz: $\hat{A} \mid \psi(t_0) \,\rangle = a \mid \psi(t_0) \,\rangle \Rightarrow \langle \psi(t_0) \mid \hat{A} \mid \psi(t_0) \,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, \hat{A} \,\rangle_{t_0} = a$,
$\Delta_{t_0}\hat{A} \stackrel{\text{def}}{=} (\langle \psi(t_0) \mid (\hat{A} - \langle\, \hat{A} \,\rangle)^2 \mid \psi(t_0) \,\rangle)^{\frac{1}{2}} = 0$ (uporediti Teorem T 1.4.2 i Korolare K 2.2.1, K 2.2.1). Na osnovu Korolara K 8.3.1 i K 8.3.2 onda sledi $\langle \psi(t) \mid \hat{A} \mid \psi(t) \,\rangle = a$, $\Delta_t\hat{A} = 0$, $\Rightarrow \hat{A} \mid \psi(t) \,\rangle = a \mid \psi(t) \,\rangle$. *Q. E. D.*

Zadatak 8.3.9 Dokazati Korolar K 8.3.3 geometrijski, tj. pomoću pojmova kao što su potprostori, redukovanje operatora itd.

Kada je jedna opservabla $\hat{A}$ kompatibilna sa hamiltonijanom konzervativnog sistema, onda se kaže da daje *dobre kvantne brojeve* (misli se na svojstvene vrednosti od $\hat{A}$ ili na neke prostije brojeve koji prebrojavaju svojstvene vrednosti). Iz prethodnih Korolara vidimo da grupa simetrije hamiltonijana služi kao izvor za nalaženje ili konstrukciju opservabli koje daju dobre kvantne brojeve. Osim toga, iz istih Korolara možemo zaključiti da je puni kvantno-mehanički sadržaj dobrih kvantnih brojeva u sledećem:

(i) Opservabla kompatibilna sa $\hat{H}$ može da dopuni hamiltonijan (sa eventualno još nekim takvim opservablama) do potpunog skupa kompatibilnih opservabli, koji će dati *potpunu klasifikaciju stanja*, tj. svojstveni bazis od $\hat{H}$. Na jeziku kvantnih brojeva možemo reći da dobri kvantni brojevi dopunjuju energetske nivoe sistema (ili njihov kvantni broj) do potpunog skupa kvantnih brojeva koji karakterišu svojstvena stanja hamiltonijana.

(ii) Dobri kvantni brojevi ostaju "dobri" u toku vremenske evolucije sistema, tj. stanja ne mogu da izgube dotične svojstvene vrednosti. To su analogoni integrala kretanja u klasičnoj mehanici.

Najčešće grupa simetrije hamiltonijana sa kojom raspolažemo nije dovoljno bogata i ne može se postići samo pomoću nje potpuna klasifikacija stanja. Postiže se samo delimična klasifikacija (koja rezultuje u svojstvenim potprostorima, a ne u stanjima). Onda se govori o *klasifikaciji energetskih nivoa.*

Za kvantne sisteme u kojima je materija koncentrisana oko centra mase (tako da izdaleka izgledaju kao čestice), kao što su jezgra, atomi i mnogi molekuli, prirodno je koordinatni početak staviti u centar mase i koristiti se *a priornim* osobinama prostora: izotropnošću (oko centra mase) i nerazlikovanjem levog i desnog koordinatnog sistema. Tako $\hat{\mathbf{J}}^2$ i $\hat{\mathcal{I}}_p$ su najosnovnije opservable koje daju dobre kvantne brojeve: J^{Π} (J je kvantni broj sveukupnog uglovnog momenta, a $\Pi = \pm 1$ je ukupna parnost[8.3.7]).

Zadatak 8.3.10 Izvesti rezultate ovog paragrafa u Heisenberg-ovoj slici i prodiskutovati pogodnost Schrödinger-ove i Heisenberg-ove slike u tu svrhu.

8.3.8 Selekciona pravila

Dobri kvantni brojevi imaju veoma važnu primenu u izučavanju gađanja mete snopom čestica kada i u meti i u izlaznom snopu nastaje promena u samoj vrsti čestica. To su tzv. reakcije u nuklearnoj fizici, a tzv. procesi u fizici elementarnih čestica. Pomoću dobrih kvantnih brojeva moguće je čitavu klasu ovakvih procesa isključiti kao teorijski nemoguće i pri tome se govori o selekcionim pravilima. Sad ćemo to podrobno objasniti.

Korolar 8.3.4 *Ako početno stanje* $\mid \psi(t_0) \rangle$ *kvantnog sistema ima određenu vrednost dobrog kvantnog broja, onda je verovatnoća prelaza u drugo stanje* $\mid \varphi \rangle$ *sa* drugom vrednošću *istog kvantnog broja u bilo kom kasnijem trenutku jednaka nuli, tj.*

$$v(\psi \to \varphi, t) = |\langle \varphi \mid \psi(t)\rangle|^2 = 0. \tag{8.3.21}$$

[8.3.7] Misli se na ukupnu orbitnu parnost. Nukleon ima spinsku parnost 1, a takođe i elektron, tako da se mogu izostaviti.

Dokaz: Dokaz sledi neposredno iz *(ii)* u prethodnom paragrafu, jer $|\,\psi(t)\,\rangle = \hat{U}(t)\,|\,\psi(t_0)\,\rangle$ zadržava istu vrednost dobrog kvantnog broja, te se $|\,\varphi\,\rangle$ i $|\,\psi(t)\,\rangle$ nalaze u ortogonalnim svojstvenim potprostorima (opservable koja daje dotični dobar kvantni broj) i sledi (8.3.21). *Q. E. D.*

Neka je dat (simbolično napisan) proces

$$a + b \to c + d \tag{8.3.22}$$

i pretpostavimo da kvantni sistem $|\ ab\,\rangle$ u t_0 ima određenu vrednost nekog dobrog kvantnog broja, a da sistem $|\,cd\rangle$ ima *drugu vrednost* istog kvantnog broja. Proces (8.3.22) znači da imamo određeni merni uređaj u kome može da se detektuje, recimo čestica d (i, po pravilu, zaključi da je u meti ostala čestica c). Tu se, u stvari, radi o merenju prelaza $|\ ab\,\rangle \to |\ cd\,\rangle$ u trenutku t. Međutim, kao što sledi iz Korolara K 8.3.4, naše pretpostavke iziskuju $v(|\,ab\,\rangle \to|\,cd\,\rangle, t) = 0$, tj. ovaj proces ne može da se desi[8.3.8]. To se naziva *selekcionim pravilom* dotičnog dobrog kvantnog broja (ili opservable čiji je to kvantni broj).

8.3.9 * Približno dobri kvantni brojevi i približna selekciona pravila

Nekad neka opservabla $\hat{A}$ može biti od koristi i ako je samo približno kompatibilna sa hamiltonijanom, tj. ako je $[\ \hat{A}, \hat{H}\ ]$ mali operator (tj. u bilo kojoj reprezentaciji bilo koji matrični element matrice koja ga reprezentuje je po modulu mali broj). Onda će početno stanje $|\ \psi(t_0)\,\rangle$, koje je svojstveno stanje hamiltonijana, po pravilu, biti samo približno svojstveno stanje opservable $\hat{A}$, tj. $\langle\psi(t_0)\ |\ \hat{A}\ |\ \psi(t_0)\,\rangle \approx a$, gde je a svojstvena vrednost od $\hat{A}$ i $\Delta_t\hat{A} \approx 0$. Pošto po pretpostavci imamo svojstveno stanje hamiltonijana, vremenska evolucija samo menja fazni faktor vektora stanja (a ne i samo stanje) i tako to stanje celo vreme ima približno oštru vrednost a od $\hat{A}$.

Kod nekih atomskih sistema, na primer, dominantni deo hamiltonijana komutira posebno sa operatorima ukupnih orbitnih rotacija i posebno sa operatorima ukupnih spinskih rotacija, a samo jedan mali sabirak u hamiltonijanu ne komutira, tj. narušava pomenute simetrije. Zato su L, M_L, S i M_S približno dobri kvantni brojevi koji su korisni za (približno) karakterisanje osnovnog stanja takvog sistema.

Opisali smo slučaj kada smo u početnom (i u svakom kasnijem) stanju imali oštru vrednost energije i približno oštru vrednost približno kompatibilne opservable $\hat{A}$. Moguć je i suprotan slučaj: da sistem u početnom stanju $|\ \psi(t_0)\,\rangle$ ima samo približno oštru vrednost energije, tj. da se pojavljuje tzv. širina energetskog nivoa (pobuđeno stanje), a da sistem ima oštru vrednost, recimo a, približno kompatibilne opservable $\hat{A}$. Takav sistem se u toku vremena "raspada", tj. postoji pozitivna verovatnoća prelaza u savim drugačije stanje, čak i u stanje sa drugom svojstvenom vrednošću, recimo b, opservable $\hat{A}$.

Pomenuta mogućnost $0 < v(|\ a\,\rangle \to|\ b\,\rangle, t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} |\langle b\ |\ \hat{U}(t)\ |\ a, t_0\,\rangle|^2$ potiče od toga što usled nekomutiranja $\hat{H}$ sa $\hat{A}$, ne komutira ni $\hat{U}(t)$ sa $\hat{A}$, i stanje $|\ a, t\,\rangle = \hat{U}(t)\ |\ a, t_0\,\rangle$ može da sadrži "primesu" (koherentnu) svojstvenog stanja od $\hat{A}$ koja odgovara svojstvenoj vrednosti b, tj. projekcija od $|\,a, t\rangle$ na odgovarajući svojstveni potprostor više nije nula. Ali pošto $\hat{H}$ približno komutira sa $\hat{A}$ (samo mali term u $\hat{H}$ ne komutira), isto važi i za $\hat{U}(t)$ i pomenuta "primesa" je

[8.3.8] Podsetimo se Postulata o pojedinačnim kvantnim sistemima, zahvaljujući kome stvarno možemo tvrditi da se ni jedan proces opisanog tipa ne može desiti u prirodi (ili ako se desi, moramo menjati teoriju).

mala (po normi), tako da je onda i *verovatnoća prelaza* $v(|\, a\,\rangle \to |\, b\,\rangle, t)$ *mala.* U ovom slučaju se govori o *aproksimativnom selekcionom pravilu.*

Zadatak 8.3.11 Neka je u trenutku $t' > t_0$ norma projekcije od $\hat{U}(t) \mid a, t_0 \rangle$ u svojstveni potprostor V_b od $\hat{A}$ koji odgovara svojstvenoj vrednosti b jednaka 10^{-3}. Pokazati da $v(|\, a\,\rangle \to |\, b\,\rangle, t') \approx 10^{-6}$.

Kao ilustraciju za približno selekciono pravilo uzmimo slobodni neutron. On je nestabilna čestica koja se raspada po formuli $n \to p + e^- + \overline{\nu}_e$ (proton, elektron i elektronov antineutrino). Raspadanje potiče od slabe interakcije koja predstavlja pomenuti mali sabirak pored jake i elektro-magnetne interakcije. Neutron ima treću komponentu izospina $t_3 = -\frac{1}{2}$, a proton $t_3 = \frac{1}{2}$, dok elektron i $\overline{\nu}_e$ imaju $t_3 = 0$. Sa ovim kvantnim brojem ćemo se bliže upoznati u odeljku § 8.5.

Sada ćemo ukazati na to da su jaka i elektro-magnetna interakcija kompatibilne, a slaba interakcija je nekompatibilna sa $\hat{t}_3$ (čiji je kvantni broj t_3). Znači ukupni hamiltonijan je približno kompatibilan sa $\hat{t}_3$. Početno stanje ima oštru vrednost t_3, a samo približno oštru vrednost energije (zbog $E = mc^2$, u stvari masa slobodnog neutrona nema oštru vrednost, iznosi $939,550 \pm 0,005$ MeV). U pomentom procesu sistem prelazi iz $t_3 = -\frac{1}{2}$ stanja u $t_3 = \frac{1}{2}$ stanje, ali sâm proces je prilično malo verovatan (slobodan neutron živi dosta dugo, reda veličine 10^3 s).

8.3.10 * Energetski nivoi i višestruki ireducibilni invarijantni potprostori grupe simetrije hamiltonijana

Pođimo od veoma čestog slučaja kvantnog sistema koji ima rotacionu simetriju, tj. hamiltonijan mu je invarijantan pod grupom $\{\hat{U}(\varphi\mathbf{u}) \mid R_{\varphi\mathbf{u}} \in \mathrm{R}(3)\}$.

Videli smo u § 6.3.4 da pri dekompoziciji prostora stanja na višestruke invarijantne ireducibilne potprostore $\mathcal{V}_k$ za $\hat{\mathbf{K}}$, dobijamo ne samo same ireducibilne potprostore $\mathcal{V}_{k\lambda}$, $\lambda = 1, \ldots, d_k$, nego, "unakrsno" sa njima i potprostore $\mathcal{V}_{km}$, $m = -k, \ldots, k$ (Crtež C 6.2). Videli smo da opservabla, na primer hamiltonijan, koja komutira sa $\hat{\mathbf{K}}$ redukuje se u svakom $\mathcal{V}_{km}$ i to u uzajamno ekvivalentne operatore (Teoremi T 6.3.2 i T 6.4.2).

Šta to praktično znači? Osnovni zadatak kvantno-mehaničkog opisivanja sistema je da se reši svojstveni problem hamiltonijana sistema. Korišćenje rotacione simetrije (preko "fioka" $\mathcal{V}_{km}$) znatno pojednostavljuje ovaj zadatak.

Treba uzeti proizvoljan standardni bazis za $\hat{\mathbf{K}}$ (uopšte ne mora biti prilagođen hamiltonijanu). Samim tim što je standardni, bazis je nužno adaptiran na dekompoziciju $\mathcal{H} = \oplus_k \mathcal{V}_k = \oplus_k \oplus_{m=-k}^{k} \mathcal{V}_{km}$, a svaki potprostor $\mathcal{V}_{km}$ je nužno invarijantna za hamiltonijan. Kada se $\hat{H}$ reprezentuje u pomenutom bazisu, matrica H koja ga predstavlja nužno je kvazidijagonalna, tj. direktni je zbir podmatrica: $H = \oplus_k \oplus_{m=-k}^{k} H_{km}$, gde je svaka podmatrica H_{km} reda $d_k \times d_k$, nalazi se na dijagonali od H i imamo podudaranje matrica: $H_{k,m=k} = H_{k,m=k-1} = \ldots = H_{k,m=-k}$, $\forall k$, na šta se svodi pomenuta ekvivalentnost.

Treba uočiti da smo podmatrice H_{km} dobili bez ikakve dijagonalizacije, samo na osnovu simetrije. Tek sada postaje aktuelna dijagonalizacija i to dijagonalizujemo *samo jednu* od svake klase od po $2k+1$ jednakih podmatrica H_{km}, $m = k, \ldots, -k$ (rezultat se neposredno prenosi na ostale podmatrice u toj klasi).

Čitaoca već verovatno muči pitanje da li je postojanje po $2k+1$ "fioka" $\mathcal{V}_{km}$ u koje se hamiltonijan "jednako smešta" specifična odlika unitarne reprezentacije rotacione grupe ili važi

i za druge grupe simetrije hamiltonijana. Veliki značaj našeg metoda ("ormar sa fiokama") potiče upravo od činjenice što je odgovor na ovo pitanje potvrdan. Bilo koja druga Lie-jeva grupa simetrije hamiltonijana ima analogan "ormar sa fiokama" samo broj "fioka" $2k+1$ ima drugu vrednost; tzv. Casimir-ov[8.3.9] operator rotacione grupe $\hat{\mathbf{K}}^2$ se mora zameniti Casimir-ovim operatorom ili operatorima dotične grupe; mora se naći analogon ili analogoni od $\hat{K}_z$ itd.

Šta više, dekompozicija prostora stanja na višestruke invarijantne ireducibilne potprostore (sa "unakrsnim" "fiokama" kao "bonusom") *važi i za konačne grupe*, zajedno sa važnim teoremom redukovanja i ekvivalentnosti[8.3.10].

Na kraju ovog paragrafa i odeljka da ukažemo na jednu zanimljivu mogućnost inverzije uloge energetskih nivoa i "fioka" $\mathcal{V}_{km}$. Naime, u gornjem prilazu smo prvo dekomponovali $\mathcal{H}$ do potprostora $\mathcal{V}_{km}$ i onda u svakom od njih redukovali hamiltonijan. Moguć je i obratan postupak: da prvo razložimo prostor stanja $\mathcal{H}$ na svojstvene potprostore od $\hat{H}$: $\mathcal{H} = \oplus_n \mathcal{V}(E_n)$ (pretpostavimo da $\mathcal{H}$ ima čisto diskretan spektar). Zbog $[\ \mathcal{H}, \hat{\mathbf{K}}\ ] = 0$, $\hat{\mathbf{K}}$ se redukuje u svakom potprostoru $\mathcal{V}(E_n)$, te možemo nakon ove redukcije izvršiti dekompoziciju potprostora $\mathcal{V}(E_n)$ na višestruke ireducibilne invarijantne potprostore za $\hat{\mathbf{K}}$, tj. "razbiti" $\mathcal{V}(E_n)$ do "fioka".

Pri opisanom postupku često se ispostavlja da u $\mathcal{V}(E_n)$ imamo jednu jedinu "kolonu", tj. jedan jedini invarijantni ireducibilan potprostor za grupu simetrije hamiltonijana. Onda je degeneracija dotičnog nivoa jednaka $2k+1$ i može se konstatovati da je degeneracija *potpuno objašnjena* pomoću dotične grupe simetrije.

Ako u $\mathcal{V}(E_n)$ imamo jedan $\mathcal{V}_k$ (tj. $\mathcal{V}(E_n) = \mathcal{V}_k$), ali dve ili više kolona, onda je degeneracija nivoa $(2k+1)\, d_k$ (a $d_k \geq 2$), tj., kao što se kaže, imamo *ekstradegeneraciju* (misli se: van one koja je prouzrokovana grupom simetrije). U ovakvom slučaju treba pokušati proširenje grupe simetrije i to treba dodavati operatore koji *komutiraju* sa operatorima već nađene grupe simetrije, takvi se operatori redukuju u "fiokama" $\mathcal{V}_{km}$ i od njih potiče pomenuta ekstradegeneracija.

Najzad, može da se desi da $\mathcal{V}(E_n)$ sadrži dva ili više $\mathcal{V}_k$ potprostora. U ovom slučaju grupa simetrije kojom raspolažemo opet nije dovoljna, treba je proširiti operatorima koji *ne komutiraju* sa operatorima u grupi simetrije, jer ti operatori preslikavaju iz jednog $\mathcal{V}_k$ u drugi (ili u superpozicije iz više $\mathcal{V}_k$ potprostora), te su oni, pored eventualno gorepomenutih komutirajućih, uzrok ekstradegeneracije, koja sad iznosi $\sum_k (2k+1)\, d_k$ (sabiramo po onim vrednostima k koji se nalaze u $\mathcal{V}(E_n)$).

Zadatak 8.3.12 Stanja $\mid E_n J M_J \lambda \rangle$, $M_J = -J, \ldots, J$ sa rotaciono simetričnim hamiltonijanom su svojstvena stanja od $\hat{H}$ koja nužno odgovaraju *istom* energetskom nivou E_n. Pokazati kako ovo sledi primenjujući obe gornje varijante "ormara sa fiokama".

8.4 * Primeri dobrih kvantnih brojeva

Pre nego što zaokružimo problematiku prethodnog odeljka sa razmatranjem invarijantnosti zakona kretanja pod antiunitarnom vremenskom inverzijom (tome ćemo posvetiti poslednja četiri paragrafa ovog odeljka), upotpunićemo stečeno opšte poznavanje uloge unitarnih simetrija u dinamičkom problemu sa detaljnom diskusijom nekoliko konkretnih fizičkih primera (paragrafi § 8.4.1-§ 8.4.5).

[8.3.9] Čitati: Kazimir.

[8.3.10] Videti, na primer: Г. Я. Любарский, *Теория Групп и ее Применение в Физике*, (Москва, Физматгиз, 1958). , glava IV, paragraf 26.

8.4.1 Izvođenje uglovne raspodele iz održanja uglovnog momenta

Kao primer invarijantnosti zakona kretnja pod rotacionom grupom (koja važi za svaki konzervativan i izolovan sistem zbog izotropnosti prostora), izvešćemo uglovni raspored raspadanja polarizovanog sigma minus hiperona Σ^- ("minus" se odnosi na električni naboj). Radi se o procesu

$$\Sigma^- \to n + \Pi^-, \tag{8.4.1}$$

koji predstavlja jedini način raspadanja ove teške elementarne čestice ($m \approx 1197\,\mathrm{MeV}$, srednji život $\overline{\sigma} \approx 10^{-10}\,\mathrm{s}$) i to se odigrava preko slabe interakcije. Naime, pomenuti relativno dugi srednji život znači da je dotični raspad relativno malo verovatan, a to sa svoje strane indicira da jaka i elektromagnetna interakcija (koje su mnogo jače od slabe interakcije) ne učestvuju u prouzrokovanju ovog procesa.

Pretpostavimo da je Σ^- potpuno polarizovan duž z ose, tj. da je u svojstvenom stanju $|\,+\rangle$ projekcije spina $\hat{s}_z$ (hiperoni imaju spin $s = \frac{1}{2}$), uporediti Crtež C 8.2 (a). Osim toga, pretpostavićemo da je Σ^- u koordinatnom početku, tako da produkti raspadanja izleću iz koordinatnog početka radijalno. Stoga su njihovi $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$ paralelni, što iziskuje $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = 0$ i za n i za Π^-[8.4.1]. Imamo $\hat{\mathbf{L}} = 0$ i $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}}$ i pre i posle raspada. Iako interakcija nije invarijantna posebno pod orbitnim i posebno pod spinskim rotacijama, u ovom slučaju se konzervacija ukupnog $\hat{\mathbf{J}}$ svodi na konzervaciju $\hat{\mathbf{S}}$. To praktično znači da je projekcija spina neutrona (Π^- ima spin nula) na bilo koju osu jednaka projekciji spina Σ^- na istu osu.

Pošto je Σ^- po pretpostavci polarisan i neutron mora biti u $|\,+\rangle$ spinskom stanju bez obzira koliki je ugao θ (videti Crtež C 8.2 (b)). Problem je očigledno aksijalno simetričan oko $\mathbf{z}_0$ (orta z-ose), zato se azimutalnim uglom φ nećemo ni koristiti.

Zadatak 8.4.1 Pokazati da lokalizacija čestice u koordinatnom početku, tj. $\langle\, \hat{\mathbf{r}}\,\rangle \approx 0$ uz dovoljno male neodređenosti $\Delta\hat{\mathbf{r}} \ll 1$, povlači $l = 0$. (Indikacija: Dokazati

$$|\langle\, \hat{\mathbf{l}}^2\,\rangle| \leq \sum_{q,q',q''=x,y,z} |e_{qq'q''}\langle\, \hat{q}'\hat{p}_{q''}\hat{l}_q\,\rangle| \leq \sum_{q,q',q''=x,y,z} |e_{qq'q''}|\langle\, \hat{q}'^2\,\rangle^{\frac{1}{2}}\langle\, (\hat{p}_{q''}\hat{l}_q)^2\,\rangle^{\frac{1}{2}} \approx$$

$$\approx \sum_{q,q',q''=x,y,z} |e_{qq'q''}|\Delta\hat{q}'\langle\, (\hat{p}_{q''}\hat{l}_q)^2\,\rangle^{\frac{1}{2}},$$

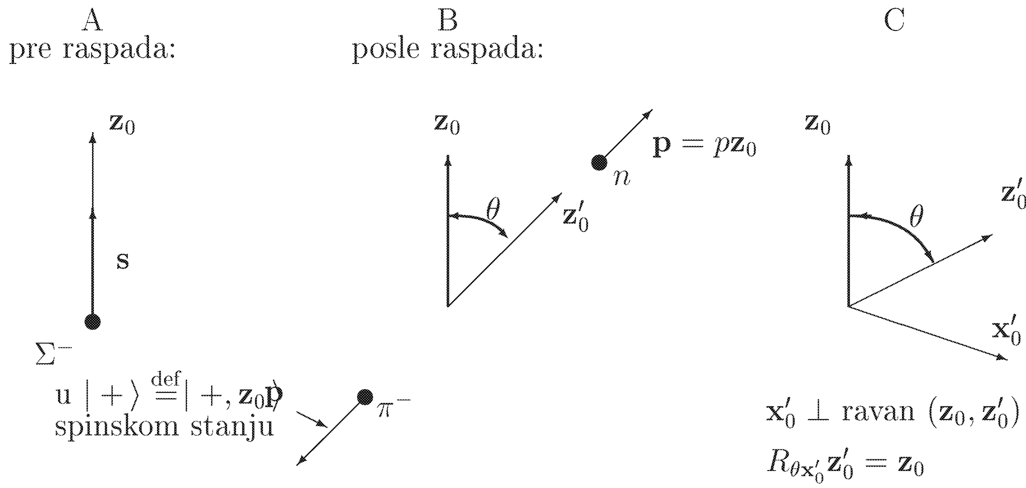
gde je $\epsilon_{qq'q''}$ simbol Levi–Civita. Pri tome se koristimo Schwartz-ovim teoremom i teoremom o disperziji.)

Ako neutron izleće pod uglom θ, pion se emituje u suprotnom smeru, jer Σ^- je bio u stanju mirovanja (impuls nula) u sistemu centra mase. Stoga je stanje $|\; n, \Pi^-\,\rangle$ u stvari određeno stanjem neutrona (i u daljnjem ne pišemo stanje piona, misleći ipak na $|\,n, \Pi^-\,\rangle$).

Pitamo se kolika je verovatnoća $v(\theta)$ da se neutron emituje pod uglom θ, tj. kolika je verovatnoća prelaska u to stanje (u nekom trenutku koji za ovu diskusiju nije važan).

Na prvi pogled mi samo znamo da n ima $|\,+, \mathbf{z}_0\,\rangle$ (tj. $|\,+\rangle$) spinsko stanje za svako θ.

[8.4.1] Fragmenti raspadanja se detektuju u mernom aparatu, na primer u Wilson-ovoj komori. Na primer po "tragu" koji čestica ostavlja zaključujemo i gde je i kamo se kreće, skoro kao da istovremeno merimo $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$. U stvari ne dobijamo oštre vrednosti ovih opservabli, a relacije neodređenosti $\Delta\hat{q}\,\Delta\hat{p}_q \geq \frac{\hbar}{2}$, $q = x, y, z$, su zadovoljene. Ipak, to nema uticaja na diskretni kvantni broj l. To neće primešati p-stanje ($l = 1$) i druge vrednosti za l uz s-stanje ($l = 0$).



Slika 8.2: **Shema procesa (8.4.1).**

Pretpostavimo da zajedno sa prostornim stanjem neutrona ("pod kojim uglom[8.4.2] θ izleće") merimo i (kompatibilnu) opservablu $\hat{s}_{z'} \stackrel{\rm def}{=} \hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{z'}_0$ kako bismo složeni događaj "izleće pod θ" razložili na elementarne kvantne događaje "pod θ, spin $+$, $\mathbf{z'}_0$" i "pod θ, spin $-$, $\mathbf{z'}_0$". Verovatnoća složenog događaja, $v(\theta)$, je zbir verovatnoća prelazaka stanja $|\,\Sigma^-$ miruje u $\mathbf{r}=0$, spin $+$, $\mathbf{z}_0\rangle$ u pomenuta stanja n, Π^--sistema (uporediti (2.2.5)).

Zadatak 8.4.2 Pokazati da $\mathbf{z}_0 = R_{\theta\mathbf{x}'_0}\mathbf{z}'_0$ (Crtež C 8.2 (c)) ima za posledicu

$$\hat{s}_z = \hat{U}_s(\theta\mathbf{x}'_0)\,\hat{s}_{z'}\,\hat{U}_s^{-1}(\theta\mathbf{x}'_0), \quad |+,\mathbf{z}_0\rangle = \hat{U}_s(\theta\mathbf{x}'_0)\,|+,\mathbf{z}'_0\rangle. \tag{8.4.2a,b}$$

(Indikacija: Koristiti se definicijom vektorskog operatora za $\hat{\mathbf{s}}$ i svojstvenom jednakošću za $\hat{s}_{z'}$.) Pokazati takođe da iz (8.4.2) i (6.10.17) (formula za $U_s(\varphi\mathbf{u})$, koristimo je u $\{\mathbf{x}'_0, \mathbf{y}'_0, \mathbf{z}'_0\}$) sledi

$$|+,\mathbf{z}_0\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,|+,\mathbf{z}'_0\rangle - \imath\sin\frac{\theta}{2}\,|-,\mathbf{z}'_0\rangle. \tag{8.4.3}$$

Primenjujući (8.4.3) na početno stanje (čestice Σ^-) za gore pomenute verovatnoće prelaza možemo pisati[8.4.3]:

$$\left|\langle n\,\mathrm{pod}\,\theta;\ \mathrm{spin}+,\ \mathbf{z}'_0\mid\hat{U}(t)\mid\Sigma^-,\mathrm{spin}+,\ \mathbf{z}_0\rangle\right|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2}\left|\langle n\,\mathrm{pod}\,\theta;\ \mathrm{spin}+,\ \mathbf{z}'_0\mid\hat{U}(t)\mid\Sigma^-,\mathrm{spin}+,\ \mathbf{z}'_0\rangle\right|^2 \tag{8.4.4a}$$

(opet smo iskoristili gore objašnjeno održanje projekcije spina pod $\hat{U}(t)$).

Analogno kao (8.4.4a), sledi

$$\left|\langle n\,\mathrm{pod}\,\theta;\ \mathrm{spin}-,\ \mathbf{z}'_0\mid\hat{U}(t)\mid\Sigma^-,\mathrm{spin}+,\ \mathbf{z}_0\rangle\right|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2}\left|\langle n\,\mathrm{pod}\,\theta;\ \mathrm{spin}-,\ \mathbf{z}'_0\mid\hat{U}(t)\mid\Sigma^-,\mathrm{spin}-,\ \mathbf{z}'_0\rangle\right|^2. \tag{8.4.4b}$$

[8.4.2] Radi se o malom prostornom uglu oko θ ili još preciznije, o tankom konusu (zbog $0 \le \varphi < 2\pi$) oko θ. I, naravno, u stvari se radi o gustini verovatnoće, jer je raspodela po θ kontinualna.

[8.4.3] $|\,\Sigma^-,\dots\rangle$ i $|\,n,\Pi^-,\dots\rangle$ naravno, ne pripadaju istom prostoru stanja. Ispravnije bi bilo opisivati proces u prostoru druge kvantizacije (uvešćemo je tek u glavi 11) gde je sadržana mogućnost od nule do neograničeno mnogo čestica bilo koje vrste. Ipak, i u prostoru "prve kvantizacije", kao u tekstu, može se ukazati na suštinu problema.

Drugi faktor na desnoj strani od (8.4.4a) je verovatnoća emisije neutrona u pravcu polarizacije čestice Σ^- i ova verovatnoća očigledno ne zavisi od θ (θ u ovom slučaju pokazuje iz kojeg koordinatnog sistema gledamo događaj, tj. $\mathbf{z}_0$ nije definisan fizičkim osobinama samog procesa, za razliku od θ ugla u našem početnom problemu). Obeležimo ovaj faktor sa α (u stvari $\alpha(t)$). Analogno možemo zaključiti da drugi faktor na desnoj strani od (8.4.4b) takođe ne zavisi od θ; obeležimo ga sa β.

Znači, zbog gore pomenutog sabiranja verovatnoća elementarnih događaja u verovatnoću složenog događaja, na osnovu (8.4.4) tražena verovatnoća glasi $v(\theta) = \alpha\cos^2\frac{\theta}{2} + \beta\sin^2\frac{\theta}{2}$, što se usled $\cos^2\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1+\cos\theta)$, $\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1-\cos\theta)$, može napisati u vidu

$$\boxed{v(\theta) = \gamma + \delta\cos\theta}, \tag{8.4.5}$$

sa $\gamma \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\alpha+\beta}{2}$, $\delta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\alpha-\beta}{2}$.

Dakle, naš konačni rezultat glasi: uglovna distribucija emitovanja neutrona (pri polarizovanom Σ^-: spin $+$, $\mathbf{z}_0$) je *linearna funkcija od kosinusa ugla θ.*

Zadatak 8.4.3 Pokazati da bi održanje parnosti u (8.4.1) (koje u stvari ne važi pošto proces potiče od slabe interakcije!) imalo za posledicu $\delta = 0$ u (8.4.5).

8.4.2 Određivanje unutrašnje parnosti hiperona u nuklearnoj reakciji

Eksperimentalno može da se dobije sledeća nuklearna reakcija:



$$K^- + {}^4\text{He} \rightarrow {}^4_\Lambda\text{He} + \Pi^-. \tag{8.4.6}$$

Teški mezon K^- ($m \approx 494\,\text{MeV}$) prelazi u laki mezon Π^- ($m \approx 140\,\text{MeV}$), a jedan laki barion n ($m \approx 940\,\text{MeV}$) u sastavu ${}^4\text{He}$ prelazi u teški barion (tzv. lambda-hiperon) Λ ($m \approx 1116\,\text{MeV}$), koji ostaje na mestu neutrona (usled sličnih osobina) u sastavu sličnog jezgra koje obeležavamo sa ${}^4_\Lambda\text{He}$ (sadrži 2 protona, neutron i Λ). Ovakvo jezgro se naziva hiperfragment[8.4.4].

Pošto je proces (8.4.6) posledica jake interakcije, parnost se održava u njemu. Pretpostavimo da početno stanje $|\,K^-, {}^4\text{He}\rangle$ ima određenu parnost, onda krajnje stanje $|\,\Pi^-, {}^4_\Lambda\text{He}\rangle$ mora da ima istu parnost (uporediti i prethodnu fusnotu). Radi se o petočestičnom sistemu, a svaka čestica ima orbitno i spinsko faktor stanje i, prema tome, i orbitnu i unutrašnju parnost. Dakle, parnost i početnog i krajnjeg stanja je proizvod od po 10 parnosti i ta dva proizvoda su jednaka. Na prvi pogled, imamo previše složen slučaj da bi bio od koristi. Međutim, u stvari nije tako.

Nije pogodno (8.4.6) posmatrati kao 5-čestični proces; pogodnije je u (8.4.6) videti jedan dvo-čestični proces. Onda imamo u igri po dve unutrašnje i po dve orbitne parnosti. *Unutrašnja parnost* od ${}^4\text{He}$ (ili ${}^4_\Lambda\text{He}$) je parnost te složene čestice i ona zavisi od celokupne strukture dotičnog sistema (ali baš to i jeste jednako u ${}^4\text{He}$ i u ${}^4_\Lambda\text{He}$). Ove čestice se uzimaju u stanju mirovanja, iako to ne znači oštre vrednosti za $\mathbf{r}$ i $\mathbf{p}$, to ipak jeste oštra vrednost $l = 0$ i $\Pi_l = (-1)^l = 1$.

Svrsishodno je izvršiti transformaciju sa dve čestice na dve efektivne čestice: centar masa (CM) i relativnu česticu ($R\check{C}$), što smo proučavali u § 4.5.

[8.4.4] Tabelarni pregled hadrona (tj. teških elementarnih čestica među koje spadaju mezoni i barioni) dat je u Tabeli Tb 8.1 u kontekstu izospina.

Zadatak 8.4.4 Pokazati da je $\mathcal{H}_{12}^{(o)} = \mathcal{H}_{CM}^{(o)} \otimes \mathcal{H}_{R\check{C}}^{(o)}$ (4.5.19) propraćeno faktorizacijom operatora prostorne inverzije

$$\hat{\mathcal{I}}_{12}^{(p)} = \hat{\mathcal{I}}_{CM}^{(p)} \otimes \hat{\mathcal{I}}_{R\check{C}}^{(p)}, \tag{8.4.7}$$

gde su $\hat{\mathcal{I}}_{CM}^{(p)}$ i $\hat{\mathcal{I}}_{R\check{C}}^{(p)}$ definisani u $\mathcal{H}_{CM}^{(o)}$ odnosno u $\mathcal{H}_{R\check{C}}^{(o)}$ potpuno analogno kao $\hat{\mathcal{I}}_p$ u $\mathcal{H}_o$.

Nakon pomenute transformacije na efektivne čestice imamo umesto orbitnih parnosti čestica (pre i posle procesa) parnost centra mase CM pre i posle i parnost relativne čestice $R\check{C}$ pre i posle. Pošto nam je centar mase smešten u koordinatnom početku (i nalazi se u stanju mirovanja), parnost centra mase je $(-1)^{l_{CM}=0} = 1$ pre i posle i ovaj faktor možemo zaboraviti. Preostaje parnost $(-1)^{l_{R\check{C}}}$ pre i posle.

Poznato je da sistemi ^{4}He i $^4_\Lambda$He u osnovnom stanju (u kome su u procesu (8.4.6)) imaju $J = 0$, a mezoni K^- i Π^- takođe imaju unutrašnji uglovni moment[8.4.5] $s = 0$. Pošto je fizički sistem u kome se dešava prelaz (8.4.6) izolovan i konzervativan, imamo konzervaciju ukupnog uglovnog momenta. To se u ovom slučaju svodi na konzervaciju ukupnog orbitnog uglovnog momenta (u kontrastu sa slučajem iz prethodnog paragrafa). Pošto je centar mase u s stanju pre i posle, u stvari imamo konzervaciju orbitnog uglovnog momenta relativne čestice, tj. $l_{R\check{C}}$ je isti pre i posle. Ovo povlači da i $(-1)^{l_{R\check{C}}}$ ostaje nepromenjeno[8.4.6]. Znači, i ovaj faktor možemo da zaboravimo.

Dakle, sledi zaključak da je proizvod unutrašnje parnosti od K^- i od ^{4}He jednak proizvodu unutrašnje parnosti od $^4_\Lambda$He i Π^-. Pioni K^- i Π^- imaju jednaku unutrašnju parnost (i to negativnu, to su tzv. pseudoskalarne čestice — rečca "pseudo" znači da je unutrašnja parnost -1, a termin "skalarna čestica" označava $s = 0$). Preostaje da unutrašnja parnost ^{4}He mora biti jednaka unutrašnjoj parnosti od $^4_\Lambda$He. Pošto ^{4}He i $^4_\Lambda$He imaju u osnovnom stanju takoreći jednaku strukturu, to može biti samo ako je *unutrašnja parnost hiperona Λ jednaka unutrašnjoj parnosti neutrona.* To je naš konačan zaključak.

Zadatak 8.4.5 U realnom procesu (8.4.6) ne moramo imati oštru vrednost ukupne parnosti s leve i desne strane. Pokazati da ipak iz održanja parnosti pri vremenskoj evoluciji sistema sledi

$$0 < |\langle f \mid \hat{U}(t) \mid i \rangle|^2 = |\langle f \mid \hat{P}_+ \hat{U}(t) \hat{P}_+ \mid i \rangle|^2 + |\langle f \mid \hat{P}_- \hat{U}(t) \hat{P}_- \mid i \rangle|^2 \tag{8.4.8}$$

($| i \rangle \stackrel{\text{def}}{=} | K^-, {}^4\text{He} \rangle$, $| f \rangle \stackrel{\text{def}}{=} | {}^4_\Lambda\text{He}, \Pi^- \rangle$; $\hat{P}_\pm$ su svojstveni projektori ukupnog $\hat{\mathcal{I}}_p$); što znači da je bar jedna od verovatnoća sa oštrom parnošću pozitivna i tako imamo pravo na gornje rezonovanje.

8.4.3 Tau-teta zagonetka i teorijska predikcija neodržanja parnosti u slaboj interakciji

Kao što smo istakli u § 8.3.3, u otkriću neodržanja parnosti u slaboj interakciji teorija je išla ispred eksperimenta. Pošto je kvantna mehanika teorijska grana fizike, proučićemo ovaj slučaj podrobnije radi uzora uspešne teorijske analize.

[8.4.5] Treba zapaziti da dok se za elementarnu česticu pod "spinom" podrazumeva unutrašnji uglovni moment, za složenu česticu to je ukupni uglovni moment. Pri tome u $\hat{\mathbf{J}}$ je uključen ukupni orbitni uglovni moment $\hat{\mathbf{L}}$ i to oko centra mase složenog sistema, ali ne i orbitni uglovni moment centra mase oko neke spoljašnje tačke (kao na primer, orbitni moment centra mase od ^{4}He oko centra mase od K^- i ^{4}He na levoj strani od (8.4.6)).

[8.4.6] Čak možemo i dozvoliti da početno stanje $| K^-, {}^4\text{He} \rangle$ nema oštru vrednost $l_{R\check{C}}$, dovoljno je da su koherentno pomešani $l_{R\check{C}}$ vrednosti samo određene parnosti.

U gore pomenutom radu Lee-a i Yang-a autori su dali ideju razrešenja tzv. $\mathcal{T}-\Theta$ zagonetke koju ćemo sad objasniti. Čestice $\mathcal{T}^+$ i Θ^+, kako su se tada zvale, raspadaju se na sledeći način:

$$\mathcal{T}^+ \rightarrow \Pi^+ + \Pi^+ + \Pi^-, \quad \Theta^+ \rightarrow \Pi^+ + \Pi^o \qquad (8.4.9a,b)$$

(to su bile eksperimentalne činjenice).

Zadatak 8.4.6 Pretpostavimo da se u (8.4.9) održava uglovni moment i parnost. Pokazati da iz činjenica:

(i) da je Θ^+ približno u stanju mirovanja i

(ii) da su pioni pseudoskalarne čestice

sledi da je relativni uglovni moment l za Π^+ i Π^o u (8.4.9) jednak spinu s od Θ^+, a parnost od Θ^+ da iznosi[8.4.7]

$$\Pi_{\Theta^+} = (-1)^s. \qquad (8.4.10)$$

Zadatak 8.4.7 Pređimo sa tročestičnog sistema na desnoj strani (8.4.9) na relativnu česticu od Π^+ i Π^+, na relativnu česticu od Π^- i centar mase od Π^+ i Π^+ i, najzad, na centar mase od sva tri piona. Pokazati da pretpostavljajući održanje istih simetrija i iz činjenica analognih sa *(i)* i *(ii)* iz prethodnog Zadatka sledi

$$\Pi_{\mathcal{T}^+} = -(-1)^{l_1+l_2}, \qquad (8.4.11a)$$

gde se indeksi 1 i 2 odnose na pomenute dve relativne čestice (uporediti (4.5.28), analogno se uopštava množenje parnosti $\Pi = (-1)^L(-1)^l$ centra mase i relativne čestice na više efektivnih čestica).

Zadatak 8.4.8 Pretpostavimo da Π^- u (8.4.9) izleće sa neznatnom kinetičkom energijom, tj. da je praktički u stanju mirovanja (kao i $\mathcal{T}^+$). Pokazati da je onda i centar mase od Π^+ i Π^+ približno u stanju mirovanja i da sledi $l_2 = 0$. (Indikacija: U analogiji sa Zadatkom Z 8.4.1 gore, pokazati da za $\langle\, \hat{\mathbf{p}}\, \rangle \approx 0$ i $\Delta\hat{\mathbf{p}} \ll 1$ preko $|\langle\, \hat{\mathbf{l}}^2\, \rangle| \leq \sum |\epsilon_{qq'q''}| \sqrt{\langle\, (\hat{l}_q\hat{q}')^2\, \rangle}\, \Delta\hat{p}_{q''}$ sledi $l = 0$.)

Posmatrajmo sad upravo proces (8.4.9) u slučaju kad je kinetička energija od Π^- neznatna (takav proces je opserviran). Kao što je rečeno u Zadatku Z 8.4.8, onda $l_2 = 0$. Ukupni uglovni moment pre raspadanja jednak je spinu s' od $\mathcal{T}^+$, a posle raspadanja, na osnovu rečenog, jednak je l_1. Iz održanja uglovnog momenta onda sledi da je spin s' od $\mathcal{T}^+$ jednak l_1, a unutrašnja parnost od $\mathcal{T}^+$ da je

$$\Pi_{\mathcal{T}^+} = -(-1)^{s'}, \qquad (8.4.2)$$

što sledi iz (8.4.11a).

Čitalac se već sigurno nestrpljivo pita gde je ovde zagonetka. Zagonetka je bila u tome što su $\mathcal{T}^+$ i Θ^+ u stvari izgledale kao da su jedna te ista čestica, jer su imale istu masu ($493,82 \pm 0,11\,\mathrm{MeV}$) i isti srednji život ($(1,235 \pm 0,004) \times 10^{-8}\,\mathrm{s}$). Bilo bi neverovatno da su se ova dva kontinualna parametra mogla podudariti za dve različite čestice! Međutim, ako se radi o jednoj čestici, onda bismo morali imati $s' = s$, a iz (8.4.2) i (8.4.10) onda sledi

$$\boxed{\Pi_{\Theta^+} \neq \Pi_{\mathcal{T}^+}}. \qquad (8.4.12)$$

U svetu elementarnih čestica dovoljno je da u jednoj inherentnoj osobini (kao na primer u unutrašnjoj parnosti) nastupi razlika, pa da u stvari imamo dve različite čestice. I tako, izgledalo je veoma zagonetno da li su $\mathcal{T}^+$ i Θ^+ ista čestica ili ne.

[8.4.7] Parnost se obeležava sa Π, isto kao pion. Čitalac mora po kontekstu da razlikuje ta dva značenja simbola.

Lee i Yang su pretpostavili da $\mathcal{T}^+$ i Θ^+ jesu iste čestice i izvukli zaključak (predikciju) *da se parnost ne održava u slaboj interakciji* (da procesi (8.4.9) potiču od slabe interakcije vidi se po relativno dugom srednjem životu). Ako se u gornjem rezonovanju odustane od održanja parnosti, onda se ne dolazi do zaključka (8.4.12).

Pokazalo se da su Lee i Yang bili u pravu. Danas se $\mathcal{T}^+ = \Theta^+$ naziva pozitivnim kaonom i piše K^+ (spin mu je nula, a unutrašnja parnost -1). Procesi (8.4.9) su dva tzv. kanala (tj. načina) raspadanja od K^+. Na prvi kanal otpada samo $5,57 \pm 0,04\,\%$ a na drugi kanal otpada $20,93 \pm 0,30\,\%$. Postoji još tri manje verovatna kanala raspadanja za K^+, a dominantni kanal $(63,77 \pm 0,29\,\%)$ glasi

$$K^+ \to \mu^+ + \nu_\mu, \tag{8.4.13}$$

gde je ν_μ mionov neutrino (spada u tzv. leptone i veruje se da je potpuno bez mase mirovanja).

8.4.4 Nultost statičkog električnog dipolnog momenta kvantnog sistema sa određenom parnošću

Dokaz teorema iz naslova paragrafa dobija se na sledeći način.

Neka je $\hat{D} \overset{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{r}}_i\, q_i$ (vektorski) operator električnog dipolnog momenta N-čestičnog sistema (q_i je električni naboj i-te čestice), a $\mid \psi \rangle$ neka je stanje određene parnosti (svojstveno stanje od $\hat{\mathcal{I}}_p$) dotičnog sistema. Onda

$$\langle \psi \mid \hat{D} \mid \psi \rangle = \sum_i q_i \langle \psi \mid \hat{\mathbf{r}}_i \mid \psi \rangle = \sum_i q_i \langle \psi \mid \hat{\mathcal{I}}_p \hat{\mathcal{I}}_p \hat{\mathbf{r}}_i \mid \psi \rangle =$$

$$= \sum_i q_i \langle \psi \mid \hat{\mathcal{I}}_p \hat{\mathbf{r}}_i \hat{\mathcal{I}}_p \mid \psi \rangle = -\langle \psi \mid \hat{D} \mid \psi \rangle = 0.$$

Iskoristili smo $\hat{\mathcal{I}}_p\, \hat{\mathbf{r}}_i = -\hat{\mathbf{r}}_i\, \hat{\mathcal{I}}_p$ (8.1.3) i $\hat{\mathcal{I}}_p \mid \psi \rangle = \pm \mid \psi \rangle$.

8.4.5 Selekciono pravilo za jednoelektronski električki dipolni prelaz u atomu

Selekciono pravilo iz naslova paragrafa glasi

$$\Delta l = \pm 1, \tag{8.4.14}$$

gde je l orbitni uglovni moment (zapravo njegov kvantni broj) elektrona o čijem je $E1$ prelazu reč. (Sa $E1$ se skraćeno izražava električni dipolni, tj. 2^1-polni prelaz.)

Električki dipolni operator $\hat{D}$ je vektorski operator, tj. on kao operator nosi kvantni broj $k = 1$ u odnosu na rotacionu grupu (uporediti pasus ispod Zadatka Z 7.4.8). Pored toga, nosi i kvantni broj $\Pi = -1$ parnosti:

$$\hat{\mathcal{I}}_p\, \hat{D}\, \hat{\mathcal{I}}_p^{-1} = -\hat{D}. \tag{8.4.15}$$

Znači, Wigner-Eckart-ov teorem za rotacionu grupu onda povlači selekciono pravilo $\Delta l = \pm 1$ ili 0 (pod pretpostavkom da je $l \geq 1$), a Wigner-Eckart-ov teorem za parnost (8.1.17) iziskuje da se parnost mora promeniti, što usled veze $\Pi = (-1)^l$ između parnosti i l, znači da se l mora promeniti za neparan broj. Dakle, nula otpada i preostaje (8.4.15).

8.4.6 Simetrija zakona kretanja pod inverzijom vremena

Pošto je vremenska inverzija neobična transformacija i po svom fizičkom smislu i po svojim matematičkim osobinama, sad ćemo posebno proučiti implikacije pretpostavke da je hamiltonijan $\hat{H}$ konzervativnog kvantnog sistema invarijantan pod ovim operatorom:

$$\hat{\mathcal{I}}_v \, \hat{H} \, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = \hat{H}. \tag{8.4.16}$$

Pitamo se šta ovo znači za zakon kretanja i za verovatnoće prelaza.

Zakon kretanja u diferencijalnom obliku glasi $\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mid \psi(t) \rangle = \hat{H} \mid \psi(t) \rangle$. Primena $\hat{\mathcal{I}}_v$ usled antilinearnosti i (8.4.16) daje

$$-\imath\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi(t) \rangle) = \hat{H} \, (\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi(t) \rangle), \tag{8.4.17}$$

što znači da $\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi(t) \rangle$ nije rešenje zakona kretanja (iako $\mid \psi(t) \rangle$ jeste). Ako zamenimo t sa $-t$ u (8.4.17) (zgodno je staviti $t_0 = 0$), onda ćemo dobiti

$$\imath\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi(-t) \rangle) = \hat{H} \, (\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi(-t) \rangle), \tag{8.4.18}$$

Dakle, $\underline{\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi(-t) \rangle}$ jeste nužno rešenje zakona kretanja ako je $\mid \psi(t) \rangle$ rešenje. Ovo je način kako vremenska inverzija deluje na trajektorije u prostoru stanja (kako se još nazivaju rešenja zakona kretanja).

Zadatak 8.4.9 Izvesti isti zaključak iz formule $\hat{U}(t) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t}$ za konzervativni kvantni sistem, tj. pokazati da važi

$$\boxed{\hat{\mathcal{I}}_v \, \hat{U}(t) \, \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} = \hat{U}(-t)} \tag{8.4.19}$$

kao posledica od (8.4.16). Pokazati da i obratno, (8.4.19) iziskuje (8.4.16).

Za nekonzervativne sisteme se obično ne proučava uticaj vremenske inverzije na zakon kretanja, jer se zbog uticaja okoline i ne očekuje simetrija u pogledu izmene smera tečenja vremena.

Što se tiče uloge koju operator $\hat{\mathcal{I}}_v$ igra u verovatnoći prelaza, za to postoji teorem pod specijalnim nazivom i njegovom izlaganju posvetićemo sledeći paragraf.

8.4.7 Princip mikroreverzibilnosti

Sad ćemo dokazati sledeći teorem, koji je poznat pod nazivom u naslovu paragrafa.

Teorem 8.4.1 *Neka je hamiltonijan $\hat{H}$ konzervativnog kvantnog sistema invarijantan pod vremenskom inverzijom, tj. neka važi (8.4.16). Ako se u početnom trenutku $t_0 = 0$ sistem preparira u čisto stanje $\mid i \rangle$ i u kasnijem trenutku $t > t_0$ izmeri da li je u stanju $\mid f \rangle$ ili ne, onda je verovatnoća prelaza $v(i \to f) \stackrel{\mathrm{def}}{=} |\langle f \mid \hat{U}(t) \mid i \rangle|^2$ jednaka verovatnoći $v(f' \to i')$ da se sistem u trenutku t_0 preparira u stanje $\mid f' \rangle \stackrel{\mathrm{def}}{=} \hat{\mathcal{I}}_v \mid f \rangle$, a da u istom kasnijem trenutku $t > t_0$ u merenju pređe u stanje $\mid i' \rangle \stackrel{\mathrm{def}}{=} \hat{\mathcal{I}}_v \mid i \rangle$, $v(f' \to i') \stackrel{\mathrm{def}}{=} |\langle i \mid \hat{\mathcal{I}}_v^{-1} \hat{U}(t) \hat{\mathcal{I}}_v \mid f \rangle|^2$:*

$$\boxed{v(i \to f) = v(f' \to i')}. \tag{8.4.20}$$

Dokaz: Iz (8.4.19) sledi $v(i \to f) = |\langle f \mid \hat{\mathcal{I}}_v^{-1}\hat{U}(-t)\hat{\mathcal{I}}_v \mid i\rangle|^2$. Pošto je $\hat{U}(-t) = \hat{U}(t)^\dagger$, možemo pisati LS = $|\langle i \mid \hat{\mathcal{I}}_v^\dagger \hat{U}(-t)\hat{\mathcal{I}}_v \mid i\rangle|^2$. U stvari, pod modulom je nestala kompleksna konjugacija kojom smo "platili" što smo prešli na skalarni proizvod vektora $\hat{\mathcal{I}}_v \mid f\rangle$ i $\hat{U}(t)^\dagger\hat{\mathcal{I}}_v \mid i\rangle$ u obrnutom redu. *Q. E. D.*

Zadatak 8.4.10 Pokazati da sama mikroreverzibilnost (8.4.20) sa svoje strane povlači invarijantnost hamiltonijana pod vremenskom inverzijom, tj. (8.4.16). (Indikacija: Iskoristiti Lemu L 8.3.2.)

Primer neizolovanog konzervativnog kvantnog sistema čiji je hamiltonijan invarijantan pod vremenskom inverzijom je sistem u spoljašnjem konstantnom električnom polju. Pošto električno polje zavisi samo od rasporeda električnosti (u ovom slučaju u okolini sistema), primena $\hat{\mathcal{I}}_v$ ne menja ovaj raspored i stoga okolnost što $\hat{\mathcal{I}}_v$ primenjujemo samo na posmatrani sistem (a ne i na okolinu gde su izvori polja) nema značaja, isto je kao da smo $\hat{\mathcal{I}}_v$ primenili na ceo nadsistem: sistem + okolina, a ovaj je konzervativan i izolovan i stoga sigurno invarijantan pod vremenskom inverzijom.

Kontraprimer neizolovanog konzervativnog kvantnog sistema čiji hamiltonijan nije invarijantan pod vremenskom inverzijom imamo u slučaju kada je sistem u konstantnom spoljašnjem magnetnom polju. Izvor magnetnog polja je u kretanju električnosti i tu $\hat{\mathcal{I}}_v$ invertuje smer kretanja i stoga i smer magnetnog polja. Znači, kad se $\hat{\mathcal{I}}_v$ primeni samo na neizolovani sistem u spoljašnjem polju, to nije isto kao da smo $\hat{\mathcal{I}}_v$ primenili na nadsistem sistem + okolina i stoga hamiltonijan nije invarijantan pod $\hat{\mathcal{I}}_v$.

8.4.8 Kramers-ova degeneracija energetskih nivoa

Invarijantnost hamiltonijana pod vremenskom inverzijom može biti uzrok degeneracije energetskih nivoa, kao što proizilazi iz narednog teorema. Ova degeneracija je poznata pod nazivom u naslovu paragrafa, a ponekad se i sam teorem naziva *Kramers-ovim teoremom.*

Teorem 8.4.2 *Ako je broj fermiona koji kvantni sistem sadrži* neparan, *a hamiltonijan sistema je invarijantan pod vremenskom inverzijom, onda je svaki energetski nivo degenerisan i, ako je multiplicitet nivoa konačan, onda je nužno paran.*

Radi dokaza Teorema T 8.4.2, formulišimo i dokažimo prvo sledeću lemu.

Lema 8.4.1 *Ako je $\hat{A}_a$ antiunitarna kosa involucija (tj. $\hat{A}_a^\dagger = \hat{A}_a^{-1} = -\hat{A}_a$) u Hilbert-ovom prostoru $\mathcal{H}$, a $\mid \varphi\rangle \in \mathcal{H}$ je proizvoljan vektor, onda je $\hat{A}_a \mid \varphi\rangle$ ortogonalan na $\mid \varphi\rangle$.*

Dokaz: Po definiciji adjungovanog antilinearnog operatora imamo $\langle \varphi \mid (\hat{A}_a \mid \varphi\rangle) = \langle \varphi \mid (\hat{A}_a^\dagger \mid \varphi\rangle)$ (bez konjugacije!). U našem slučaju DS $= -\langle \varphi \mid (\hat{A}_a \mid \varphi\rangle)$; dakle, LS $= -$LS $= 0$. *Q. E. D.*

Dokaz Teorema T 8.4.2. Ukupni operator vremenske inverzije $\hat{\mathcal{I}}_v$ je direktni proizvod ovih operatora za pojedine čestice u višečestičnom sistemu. Ako je broj fermiona u sistemu neparan, onda je ukupni $\hat{\mathcal{I}}_v$ antiunitarna kosa involucija (uporediti 8.2.28). Neka je $\mid \varphi\rangle \in \mathcal{V}(E)$, gde je $\mathcal{V}(E)$ svojstveni potprostor hamiltonijana $\hat{H}$ koji odgovara nekom energetskom nivou (svojstvenoj vrednosti) E. Iz (8.4.16) onda sledi da se $\hat{\mathcal{I}}_v$ redukuje u $\mathcal{V}(E)$. Iz Lema L 8.4.1 sledi da je $\hat{\mathcal{I}}_v \mid \varphi\rangle$ ortogonalan na $\mid \varphi\rangle$, što znači da $\mathcal{V}(E)$ ne može biti jednodimenzionalan (tj. nedegenerisan). Ako u $\mathcal{V}(E)$ postoji $\mid \psi\rangle$ ortogonalan i na $\mid \varphi\rangle$ i na $\hat{\mathcal{I}}_v \mid \varphi\rangle$, onda je i $\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi\rangle$ ortogonalan na oba ova vektora. Naime, $\mid \psi\rangle \perp \hat{\mathcal{I}}_v \mid \varphi\rangle \Rightarrow \hat{\mathcal{I}}_v \mid \varphi\rangle \perp \mid \varphi\rangle$: $\langle \varphi \mid (\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi\rangle) = \langle \psi \mid (\hat{\mathcal{I}}_v^\dagger \mid \varphi\rangle) = -\langle \psi \mid (\hat{\mathcal{I}}_v \mid \varphi\rangle) = 0$ ($\hat{\mathcal{I}}_v$ je antilinearan, uporediti (5.2.37) i (5.2.30); $(\langle \varphi \mid \hat{\mathcal{I}}_v^\dagger)(\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi\rangle) = \langle \varphi \mid \psi\rangle^* = 0$. Osim toga, $\hat{\mathcal{I}}_v \mid \psi\rangle$ je prema Lemi L 8.4.1 ortogonalan i na $\mid \psi\rangle$, te $\mathcal{V}(E)$ mora biti bar četverodimenzionalan, itd.

Zadatak 8.4.11 Pokazati da iz (8.4.16) sledi invarijantnost potprostora $\mathcal{V}(E)$ pod $\hat{\mathcal{I}}_v$.

8.4.9 Vremenska inverzija i realna matrica hamiltonijana

U mnogim problemima kvantne mehanike (na primer u približnom računu u glavi 10) uzima se jedan konačno-dimenzionalni potprostor prostora stanja kvantnog sistema i to takav da na neki način sadrži dominantni deo dinamike sistema i u njemu se odgovarajuća podmatrica hamiltonijana sistema dijagonalizuje kako bi se našla potpuna (ili delimična) klasifikacija stanja (u potprostoru). Pošto je matrični reprezentant H hamiltonijana $\hat{H}$ entitet na koji se primenjuje algoritam pomenute dijagonalizacije, važno je da matrica H bude što prostija. Dijagonalizacija je mnogo jednostavnija, na primer, kada je H realna matrica.

U ovom paragrafu proučićemo dva najvažnija slučaja u kojima je moguće naći bazis takav da H bude *realna matrica*.

(i) Pretpostavimo da je *broj fermiona* koje sistem sadrži *paran*. Onda je ukupni operator vremenske inverzije $\hat{\mathcal{I}}_v$ antiunitarna *involucija*. Pretpostavimo, takođe, da je hamiltonijan invarijantan pod vremenskom inverzijom

$$[\, \hat{\mathcal{I}}_v, \hat{H}\,] = 0. \tag{8.4.21}$$

Lema 8.4.2 *U konačno-dimenzionalnom unitarnom prostoru $\mathcal{V}$ za proizvoljan antiunitaran operator $\hat{A}_a$, koji je involucija postoji bazis koji je* invarijantan *pod $\hat{A}_a$:*

$$\hat{A}_a \mid k\,\rangle = \mid k\,\rangle, \quad \forall k. \tag{8.4.22}$$

Dokaz: Pođimo od proizvoljnog normiranog nenultog vektora $\mid \varphi\,\rangle \in \mathcal{V}$ i definišimo

$$\mid 1\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} C\,(\mid \varphi\,\rangle + \hat{A}_a \mid \varphi\,\rangle), \tag{8.4.23a}$$

C je (pozitivna) konstanta normiranja. Desna strana od (8.4.23a) je očigledno invarijantna pod $\hat{A}_a$, ali može biti nula ako slučajno $\hat{A}_a \mid \varphi\,\rangle = - \mid \varphi\,\rangle$. U ovom slučaju umesto (8.4.23a) definišemo

$$\mid 1\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \imath \mid \varphi\,\rangle. \tag{8.4.23b}$$

Pretpostavimo da smo već konstruisali $n-1$ ortonormiranih invarijantnih vektora $\mid 1\,\rangle, \mid 2\,\rangle, \ldots, \mid n-1\,\rangle$ za $\hat{A}_a$ i da je $\mathcal{V}$ više nego $(n-1)$-dimenzionalan. Onda uzmemo proizvoljno $\mid \psi\,\rangle \neq 0$ koji je ortogonalan na pomenutih $n-1$ vektora i konstruišemo iz njega $\mid n\,\rangle$ formulom (8.4.23a) ili (8.4.23b). Lako je videti da je $\mid n\,\rangle$ ortogonalan na $n-1$ prethodnih vektora. Tako smo metodom totalne indukcije dokazali Lemu L 8.4.2. *Q. E. D.*

Lema 8.4.3 *Ako je $\hat{A}_a$ antiunitarna involucija, a $\hat{B}$ linearan operator koji s njom komutira, onda je $\hat{B}$ u svakom invarijantnom bazisu za $\hat{A}_a$ reprezentovan realnom matricom.*

Dokaz: Neka je $\{\mid k\,\rangle \mid \forall k\}$ bazis invarijantan za $\hat{A}_a$, onda su matrični elementi od $\hat{B}$:

$$B_{kk'} = \langle k \mid \hat{B} \mid k'\,\rangle = \langle k \mid \hat{B}(\hat{A}_a \mid k'\,\rangle) = \langle k \mid (\hat{A}_a\hat{B} \mid k'\,\rangle) = (\langle k \mid \hat{A}_a)\hat{B} \mid k'\,\rangle^* = B^*_{kk'}.$$

Q. E. D.

Dakle, u slučaju koji smo izdvojili pod *(i)* treba samo uzeti invarijantan bazis za $\hat{\mathcal{I}}_v$, reprezentujući $\hat{H}$ u njemu dobićemo sigurno realnu matricu H.

(ii) Pretpostavimo da je *broj fermiona* u našem kvantnom sistemu *neparan* i da važi (8.4.21). Onda je ukupni operator vremenske inverzije $\hat{\mathcal{I}}_v$ antiunitarna kosa involucija. Pretpostavimo da postoji ort $\mathbf{u}$ takav da je hamiltonijan sistema invarijantan pod $\hat{U}(\pi\mathbf{u})$, rotacijom za π oko $\mathbf{u}$ u prostoru stanja. Upravo zbog neparnog ukupnog broja fermiona, i $\hat{U}(\pi\mathbf{u})$ je kosa involucija (jer je kosa involucija u spinskom faktor prostoru svakog pojedinačnog fermiona, uporediti (6.10.18) ili (6.10.19)). Osim toga važi $[\,\hat{U}(\pi\mathbf{u}),\hat{\mathcal{I}}_v\,]=0$, jer $\hat{\mathcal{I}}_v$ komutira sa svakim operatorom rotacije. Stoga, $\hat{U}(\pi\mathbf{u})\hat{\mathcal{I}}_v$ je antiunitarna involucija i u svakom njenom invarijantnom bazisu $\hat{H}$ se reprezentuje realnom matricom.

Zadatak 8.4.12 Dokazati da se komutiranje (8.2.9) proširuje i na spinski faktor prostor čestice spina $s=\frac{1}{2}$.

Zadatak 8.4.13 Ukazati na korak u kome smo iskoristili $[\,\hat{U}(\pi\mathbf{u}),\hat{\mathcal{I}}_v\,]=0$ u gornjem rezonovanju.

Dovoljan uslov da imamo slučaj *(ii)* je rotaciono invarijantan hamiltonijan (ili, kako se još kaže, sferno simetričan hamiltonijan) koji je invarijantan i pod $\hat{\mathcal{I}}_v$. Onda svaki ort $\mathbf{u}$ može da posluži za konstrukciju antiunitarne involucije $\hat{U}(\pi\mathbf{u})\hat{\mathcal{I}}_v$ kao što smo opisali.

Zadatak 8.4.14 Neka imamo cilindrično simetričan ili, kako se još kaže aksijalno simetričan hamiltonijan, tj. neka $[\,\hat{H},\hat{U}(\varphi\mathbf{z}_0)\,]=0$, $\forall\varphi$ (usmerili smo z osu duž ose simetrije sistema). Osim toga, neka $[\,\hat{H},\hat{\mathcal{I}}_v\,]=0$. Konstruisati gornju antiunitarnu involuciju.

Zadatak 8.4.15 * Prodiskutovati šta je zajedničko a šta je različito u postizanju realne matrice hamiltonijana pod *(ii)* gore s jedne strane i u postizanju realnih Clebsch-Gordan-ovih koeficijenata § 8.2.8 s druge.

8.5 * Izospin u fizici jezgara i elementarnih čestica

Ovaj odeljak je posvećen najbolje poznatoj potpuno unutrašnjoj grupi simetrije (za razliku od, na primer, grupe spinskih rotacija, koja je delimično unutrašnja), to je SU(2) grupa izospina. Pojam izospina je ponikao u nuklearnoj fizici u vezi sa protonom i neutronom i proširio se na složena jezgra i na nuklearne reakcije. Ispostavilo se da je izospin veoma vazan i za hadrone i rezonance (pobu]djena stanja hadrona), kao i za njihove procese.

8.5.1 Proton i neutron kao dva stanja nukleona

Kao što je čitalac imao prilike da se uveri, uobičajeno je da se kvantna čestica definiše izvesnim unutrašnjim osobinama kao što su masa (m), električni naboj (q), spin (s), giromagnetski faktor spina (g_s) itd., a tek onda joj se pripisuje prostor stanja. Dve osnovne čestice nuklearne fizike, neutron (n) i proton (p) na prvi pogled imaju veoma različite unutrašnje osobine:

$$n:\ m_n\approx 939.526\text{MeV},\ q=0,\ s=\frac{1}{2},\ g_s=-3.826, \tag{8.5.1a}$$

$$p:\ m_p\approx 938.232\text{MeV},\ q=e,\ s=\frac{1}{2},\ g_s=5.586. \tag{8.5.1b}$$

Me]djutim, pokazalo se da se ove razlike mogu i moraju prenebreći. Za to postoji više razloga.

i) Pre svega, neutron nije stabilna čestica, on se raspada:

$$n \to p + e + \overline{\nu}_e (\overline{\tau} \approx 10^3 \text{sec}), \tag{8.5.2}$$

gde je $\overline{\nu}_e$ tzv. elektronov antineutrino. Naime, zbir masa mirovanja protona i elektrona je manji od mase mirovanja neutrona, a smatra se da sva neutrina i antineutrina imaju masu mirovanja nula. Zato je ova reakcija na osnovu održanja energije moguća. Proces (8.5.2) se ponekad odvija i kada je n u vezanom stanju u jezgru (tzv. β^--radioaktivnost).

Proton jeste stabilna čestica, ali u vezanom stanju unutar jezgra, kada proton može da ima potrebnu energiju na račun energije okolnih čestica, ponekad dolazi do procesa

$$p \to n + e^+ + \overline{\nu}_e \tag{8.5.3a}$$

(e^+ je pozitron — antičetica elektrona, a ν_e je tzv. elektronov neutrino). To je tzv. β^+-radioaktivnost jezgara. Postoji i treća mogućnost, tzv. zahvat elektrona, iz tzv. K ljuske elektronskog omotača u atomu (tj. iz orbite najbliže jezgru):

$$p + e \to n + \nu_e. \tag{8.5.3b}$$

Zadatak 8.5.1 Procesi elementarnih čestica, kao što su (8.5.2) i (8.5.3), nazivaju se egzoergičnim ako se u njima masa mirovanja pretvara u kinetičku energiju čestica, a endoergičnim ako je zbir masa mirovanja na DS-i manji od odgovarajućeg zbira na LS-i. Koji su od pomenutih procesa egzoergični a koji endoergični i kolika se energija u njima pretvara iz mase mirovanja u energiju kretanja ili obratno (ako zanemarimo kinetičku energiju neutrina odnosno antineutrina i ako znamo da je masa elektrona (i pozitrona) $m_e \approx 0,5109$MeV).

ii) Hadroni, tj. teške elementarne čestice (videti Tabelu u Tb 8.1 niže), interaguju putem sve četiri moguće interakcije u prirodi: jakom (ili, kao što se kaže u nuklearnoj fizici, čistom nuklearnom) interakcijom, EM interakcijom, slabom interakcijom i gravitacionom interakcijom. Jedna bezdimenziona veličina koja meri jačinu ovih interakcija iznosi: 10 za jaku, $\frac{1}{137}$ za EM, 10^{-23} za slabu i 10^{-45} za gravitacionu interakciju[8.5.1].

Razlike u inherentnim osobinama n i p u (1a)-(1b) se mogu kvantitativno objasniti EM interakcijom (i to se uspešno čini u Dirac-ovoj relativističkoj kvantnoj mehanici i u kvantnoj elektrodinamici). To znači da u pogledu najjače, tj. čisto nuklearne interakcije, moguće je p i n tretirati kao identične čestice. Naime, ako teorijski zamislimo da smo "isključili" EM interakciju (što u stvarnosti nije moguće izvesti), onda p i n poprimaju jednake unutrašnje osobine. A razlike (8.5.1) potiču od toga što se p i n "nalaze" u EM polju, kao što se, na primer, elektron može nalaziti u spoljašnjem magnetskom polju (i onda je energija sprezanja sa tim poljem nejednaka na primer za stanje $|+\rangle \in \mathcal{H}_s$ i $|-\rangle \in \mathcal{H}_s$).

iii) U tzv. masenoj formuli nuklearne fizike, tj. u semiempirijskom obrascu za ukupnu energiju vezivanja svih nukleona u jezgru dominantni član je srazmeran ukupnom broju nukleona (tj. ukupnom broju protona i neutrona zajedno). To indicira da čisto nuklearna interakcija ne razlikuje p i n.

iv) U nukleon-nukleon rasejanju se ispostavilo da $p-p$, $n-n$ i $p-n$ rasejanje daju u dobroj aproksimaciji iste rezultate (ako je u sva tri slučaja prostorno-spinsko dvo-nukleonsko stanje

[8.5.1] U teoriji elementarnih čestica gravitaciona interakcija se potpuno zanemaruje, jer, s obzirom na ograničenja na preciznost laboratorijskih merenja, očekuje se da se još dugo neće moći meriti efekti koji bi poticali od ove interakcije.

isto). Tu se isploljava tzv. nezavisnost čisto nuklearne interakcije od naboja (engleski: *charge independence*, čitati: čardž indipendens), o kojoj će biti više reči niže.

1932. god. W. Heisenberg je predložio da se p i n tretiraju kao dva stanja jedne te iste čestice: *nukleona*, a da se ta stanja izraze formalizmom koji je potpuno analogan spinskom i naziva se *izospinski formalizam.*

8.5.2 Postulati o izospinu

U duhu našeg deduktivnog izlaganja, formulisaćemo sad dva postulata o izospinu. To nisu postulati kvantne mehanike, već fizike elementarnih čestica.

> I POSTULAT O VEKTORSKOJ OPSERVABLI IZOSPINA
> Svaki hadron ima pored orbitalnog i spinskog još jedan (kinematički nezavisan) unutrašnji, tzv. izospinski, stepen slobode. Drugim rečima, prostor stanja mu glasi
> $$\mathcal{H} = \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_t. \tag{8.5.4}$$
> Osnovni skup opservabli koji odre]djuje izospinski faktor prostor $\mathcal{H}_t$ je $\hat{\mathbf{t}} \stackrel{\text{def}}{=} \{\hat{t}_1, \hat{t}_2, \hat{t}_3\}$ definisan komutacionim relacijama
> $$[\, \hat{t}_1, \hat{t}_2 \,] = \imath \hat{t}_3 \quad \text{i ciklične permutacije.} \tag{8.5.5}$$
> Svaki hadron ima odre]djenu vrednost kvantnog broja t izospina, koji spada u unutrašnje karakteristike čestice.

Dakle, izospin je formalno potpuno analogan spinu (samo, za razliku od spina, nije u jedinicama $\hbar$) i sve što znamo iz opšte teorije uglovnog momenta i iz teorije spina možemo odmah preneti na izospin[8.5.2]. Drugim rečima, t možemo smatrati za (formalni) specijalni slučaj od k, kvantnog broja opšteg uglovnog momenta. Umesto magnetnog kvantnog broja m pisaćemo t_3.

Vrednost t se hadronu pripisuje semiempirijski. Sledeća Tabela daje pregled osnovnih inherentnih osobina hadrona uključujući izospin t (antihadroni uglavnom nisu obuhvaćeni Tabelom, niti su obuhvaćene rezonance). Što se tiče parnosti na Tabeli, radi se o unutrašnjoj parnosti (u spinskom faktor prostoru $\mathcal{H}_s$), koja je, kao što vidimo, jedna od unutrašnjih karakteristika hadrona. O (unutrašnjem) kvantnom broju stranosti S biće reči u sledećem odeljku.

Barionski kvantni broj B je ustvari preciziranje pojma "broja čestica" za hadrone. Naime, u procesima elementarnih čestica ne održava se broj čestica u protivurečnosti sa činjenicom da je opservabla broja čestica superselekciona opservabla u kvantnoj mehanici (uporediti § 7.5.6). Razrešenje ovog paradoksa je u tome što su pomenuti procesi relativističke prirode, samo relativistička kvantna mehanika (sinonim: kvantna teorija polja) ih pravilno opisuje. Zato mi u ovom kursu i nećemo mnogo detaljno ulaziti u ova pitanja.

Barionski broj B, koji uzima vrednosti relativnih brojeva (tj. $B = 0, \pm 1, \pm 2, ...$; negativna vrednost karakteriše antibarion, antičesticu bariona) je superselekciona opservabla u relativističkoj kvantnoj mehanici. Kao što smo videli u § 7.5.3, to znači da svaki hadron ima odre]djeno

[8.5.2] U novijoj literaturi se izospin često označava sa I. Pošto mi tako obeležavamo jediničnu matricu, držaćemo se notacije t i T (za jedan hadron odnosno za sistem nukleona), koja je više odomaćena u nuklearnoj literaturi.

B i nikad ga ne može promeniti (osim ako postaje druga čestica). Ali moguće su kreacije ili anihilacije para barion, antibarion ($B = 1$ odnosno $B = -1$, ukupno $B = 0$).

Tabela 8.1: **Osnovni hadroni.** *Za mezone* (Π *i* K), *nukleone* (N) *i hiperone* (H) *su dati: masa* $m = \frac{E}{c^2}$ *(u MeV, uz* $c = 1$*), spin* (s)*, unutrašnja parnost (UP), izospin* (t) *i njegova treća komponenta* (t_3)*, stranost* (S) *i barionski broj* (B)*. Nazivi hadrona su redom: pozitivni i negativni pion (ili pi-mezon), neutralni pion (ili pi-mezon); pozitivni i negativni kaon (ili ka-mezon), neutralni kaon (ili ka-mezon) i njegova antičestica; proton, neutron; lambda-hiperon; pozitivni, neutralni i negativni sigma-hiperon; neutralni i negativni ksi-hiperon; negativni omega-hiperon.*
Među mezonima se nalaze i čestice i antičestice (uzajamno suprotnog naboja; π_0 *je sam sebi antičestica). Svaki barion ima antičesticu (suprotnog naboja i barionskog broja) van Tabele. Antibarionska tabela je potpuno analogna barionskoj, te nije prikazana.*

Hadron			m	s	UP	t	t_3	S	B
M		Π^+	139.58	0	-1	1	1	0	0
e	Π	Π^-	139.58	0	-1	1	-1	0	0
z		Π^0	134.99	0	-1	1	0	0	0
o		K^+	493.8	0	-1	1/2	1/2	1	0
n	K	K^-	493.8	0	-1	1/2	$-1/2$	-1	0
i		K^0	497.8	0	-1	1/2	$-1/2$	1	0
		$\overline{K^0}$	497.8	0	-1	1/2	1/2	-1	0
	N	p	938.21	1/2	1	1/2	1/2	0	1
B		n	939.50	1/2	1	1/2	$-1/2$	0	1
a		Λ	1115.4	1/2	1	0	0	-1	1
r		Σ^+	1189.2	1/2	1	1	1	-1	1
i		Σ^0	1192.4	1/2	1	1	0	-1	1
o	H	Σ^-	1197.2	1/2	1	1	-1	-1	1
n		Ξ^0	1316	1/2	1	1/2	1/2	-2	1
i		Ξ^-	1321	1/2	1	1/2	$-1/2$	-2	1
		Ω^-	1675	$\frac{3}{2}$	1	0	0	-3	1

Kao kad smo uvodili spin i sad nije dovoljno uvesti izospin u formalizam kvantne mehanike, moramo postulirati i njegove opservabilne posledice i njegovu dinamičku relevantnost.

II POSTULAT O ODNOSU IZOSPINA PREMA INTERAKCIJAMA

A) U odnosu na jaku i EM interakciju opservabla električnog naboja $\hat{Q}$, treće komponente izospina $\hat{T}_3$ i stranosti $\hat{S}$ ponašaju se kao aditivue superselekcione opservable i relirane su formulom

$$\hat{Q} = \frac{1}{2}\hat{B} + \frac{1}{2}\hat{S} + \hat{T}_3, \tag{8.5.6}$$

gde su $\hat{Q}$, $\hat{B}$, $\hat{S}$ i $\hat{T}_3$ ukupne opservable sistema.

B) Dvohadronski operator jake interakcije $\hat{V}_{12}$ kompatibilan je sa vektorskim operatorom dvohadronskog izospina $\hat{\mathbf{T}}$ (ili ekvivalentno sa izorotacijama). To je tzv. *nezavisnost čisto nuklearne interakcije od naboja.*

***Napomena* 8.5.1** i) Pored $\hat{B}$ i $\hat{Q}$ je prava (tj. univerzalna) superselekciona opservabla (to je ustvari postulat kvantne elektrodinamike). Sa $\hat{T}_3$ i sa $\hat{S}$ slaba interakcija nije kompatibilna, u ovoj interakciji kvantni brojevi T_3 i S se ne održavaju i tako se (8.5.6) narušava.

ii) "Vektorski" operator $\hat{\mathbf{t}}$ (za jednu česticu) ili $\hat{\mathbf{T}}$ (za višečestični sistem) je vektorski operator *samo u odnosu na izorotacije*:

$$\hat{U}_t(\phi\mathbf{u}) = e^{\imath\phi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{T}}}, \ \phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{−lopte}, \tag{8.5.7}$$

a ne i u odnosu na prave, fizičke rotacije sa kojima operatori u (8.5.7) nemaju nikakve veze. π-lopta u (8.5.7) je čisto formalne prirode, to je skup Lie-jevih parametara grupe izorotacija[8.5.3].

iii) Smisao II Postulata B) je u tome da je jaka interakcija zavisna samo od kvantnog broja T od $\hat{\mathbf{T}}^2$, a ne i od T_3. U analogiji sa skalarnom spinski zavisnom interakcijom (7.3.13), nezavisnost jake interakcije $\hat{V}_{12}$ od naboja (preciznije: od izorotacija) ustvari znači sledeće:

$$[\,\hat{V}_{12}, \hat{\mathbf{T}}\,] = 0 \ \Leftrightarrow \ [\,\hat{V}_{12}, \hat{U}_1^{(t)}(\phi\mathbf{u})\hat{U}_2^{(t)}(\phi\mathbf{u}) = 0\,], \ \forall\phi\mathbf{u}, \tag{8.5.8a,b}$$

gde je $\hat{\mathbf{T}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{t}}_1 + \hat{\mathbf{t}}_2$. (Što se tiče ekvivalentnosti, videti korolar K 6.4.3.) Ali ova izorotaciona simetrija ne važi ni za EM ni za slabu interakciju.

Zadatak 8.5.2 Proveriti važenje formule (8.5.6) za sve hadrone iz gornje Tabele.

8.5.3 Izodublet nukleona i SU(2) grupa

Kao što vidimo iz gornje Tabale, nukleon ima $t = \frac{1}{2}$. To znači da je $\mathcal{H}_t$ (kao i $\mathcal{H}_s$) za nukleon dvodimenzionalan. Standardni bazis (analogon od $\{|\,+\rangle, |\,-\rangle\}$ u $\mathcal{H}_s$) je izodublet[8.5.4]:

$$|\,p\rangle, |\,n\rangle, \tag{8.5.9}$$

[8.5.3] U eksponentu od (8.5.7) uzima se $+\imath$ (umesto $-\imath$ kao kod spinskih rotacija), jer ovde nema homomorfizma sa grupom R(3), a ovako je prostije. U literaturi (naročito u starijoj) će se ponekad naći da se uvodi jedan ekstra 3-dimenzionalni realni prostor (potpuno fiktivan) u kome deluje jedna R(3) grupa i da se njoj pridružuje grupa iz (8.5.7). Ali sve to je nepotrebna fikcija bez fizičke relevantaosti. Sama grupa operatora izorotacija (8.5.7) je dovoljna.

stanje protona odnosno neutrona, kao što se vidi iz podataka na Tabeli, a i sledi iz formule (8.5.6). Ova formula za *nukleon* ima sledeći prostiji vid

$$\hat{Q} - \frac{1}{2} = \hat{t}_3. \tag{8.5.10}$$

Kao što smo već istakli, vektorskom operatoru $\hat{\mathbf{t}}$ u $\mathcal{H}_t$ odgovara Lie-jeva grupa izorotacija $\{\hat{U}_t(\phi\mathbf{u}) \mid \phi\mathbf{u}$ iz $\pi-$lopte$\}$, a ona se nakon reprezentovanja u (8.5.9) svodi na grupu matrica, koja se naziva SU(2), rečima: specijalua unitarna grupa u dve dimenzije. To je skup svih 2×2 kompleksnih unitarnih matrica jedinične determinante. Zato se nezavisnost čisto nuklearne interakcije od naboja naziva i SU(2)-simetrijom[8.5.5].

Pauli-jeve matrice, kada se koriste za izospin, pišu se sa τ umesto sa σ. Naime, $\hat{\mathbf{t}}$ se u (8.5.9) reprezentuje vektorskom matricom

$$\mathbf{t} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\tau}, \tag{8.5.11}$$

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\imath \\ \imath & 0 \end{pmatrix}, \tag{8.5.12a,b}$$

$$\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{8.5.12c}$$

Prema tome, matrični reprezentanti izorotacija glase

$$U_t(\phi\mathbf{u}) = e^{\frac{\imath}{2}\phi\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\tau}} = \cos\frac{\phi}{2} + \imath\tau_u \sin\frac{\phi}{2},\ \forall\phi\mathbf{u} \text{ iz } \pi-\text{lopte}, \tag{8.5.13}$$

$$\tau_u = \begin{pmatrix} u_3 & u_1 - \imath u_2 \\ u_1 + \imath u_2 & -u_3 \end{pmatrix} \tag{8.5.14}$$

(uporediti (6.10.17) i (6.10.15)).

Od posebnog je značaja izorotacija oko (fiktivnog) orta prve ose $\mathbf{x}_1$ (u prostoru formalne π-lopte) za (fiktivni) ugao π:

$$U_t(\pi\mathbf{x}_1) = e^{\imath\frac{\pi}{2}\tau_1} = \imath\tau_1. \tag{8.5.15}$$

Ona preslikava protonsko stanje na neutronsko i obratno:

$$U_t(\pi\mathbf{x}_1)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \imath\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},\ U_t(\pi\mathbf{x}_1)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \imath\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{8.5.16}$$

kao što se iz (8.5.15) i (8.5.12a) odmah vidi.

Sa značajem ove transformacije upoznaćemo se u dvonukleonskom, § 8.5.4, i višenukleonskom, § 8.5.5, slučaju.

[8.5.4] U čisto nuklearnoj literaturi uobičajena je obratna konvencija: $\mid t_3 = \frac{1}{2}\rangle = \mid n\rangle$, $\mid t_3 = -\frac{1}{2}\rangle = \mid p\rangle$, što nije u skladu sa formulama (8.5.6) i (8.5.10) kako smo ih mi napisali. Mi ćemo se držati konvencije (8.5.9), koja potiče iz fizike elementarnih čestica, i u primeni na jezgra. Pomenuta nuklearna konvencija nastala je u periodu kada proširenje i dublje zasnivanje izospina u elementarnim česticama još nije bilo poznato i zato je možemo smatrati zastarelom kao i termin "izotopski spin" za izospin, mada verovatno od njega potiče inspiracija za oznaku t i T.

[8.5.5] Formalno govoreći, i u slučaju spinski nezavisne i skalarne spinski zavisne nuklearne interakcije (u § 7.3.3) imamo SU(2) simetriju. Ali, iako se tu radi o istoj grupi matrica, one reprezentuju spinske rotacije $\hat{U}_s(\phi\mathbf{u})$ u $\mathcal{H}_s$ (u standardnom bazisu $\{\mid +\rangle, \mid -\rangle\}$); dakle, imamo sasvim drugi fizički smisao simetrije nego u slučaju izospina.

8.5.4 Izotriplet i izosinglet dvonukleonskog sistema

Kao što znamo iz proučavanja spina dve čestice sa $s = \frac{1}{2}$, § 7.3.1, za dvonukleonski izospin $\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{t}}_1 + \hat{\mathbf{t}}_2$ važi dijagram "ormar sa fiokama" (uporediti C 7.6) kao na Crtežu C 8.3. Standardni bazis u izospinskom prostoru (skup tačaka na Crtežu C 8.3) za dva nukleona $\mathcal{H}_1^{(t)} \otimes \mathcal{H}_2^{(t)}$ u notaciji $|\, TT_3 \,\rangle$ glasi:

$$|\, 11 \,\rangle = |\, p \rangle \,|\, p \rangle, \; |\, 10 \,\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|\, p \rangle \,|\, n \rangle + |\, n \rangle \,|\, P \,\rangle), \qquad (8.5.17a,b)$$

-1 [•] $\mathcal{H}_1^{(t)} \otimes \mathcal{H}_2^{(t)}$ $\|$

$T_3 = 0$ [•] $\mathcal{V}(T = 1)$

-1 [•]

$\oplus$

$T_3 = 0$ [•] $\mathcal{V}(T = 0)$

Slika 8.3: **Standardni bazis izospina dva nukleona.**

$$|\, 1, -1 \,\rangle = |\, n \rangle \,|\, n \rangle, \qquad (8.5.17c)$$

$$|\, 00 \,\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|\, p \rangle \,|\, n \rangle - |\, n \rangle \,|\, P \,\rangle); \qquad (8.5.18)$$

znači, imamo izotriplet i izosinglet. (Definicija standardnog bazisa za $\hat{\mathbf{T}}$ i C-G koeficijenti su u potpunosti preuzeti iz $\mathcal{H}_s$.)

Najopštiji vid čisto nuklearne interakcije $\hat{V}_{12}$, koja je nezavisna od naboja (II Postulat B), ima bilo koji od sledeća tri vida[8.5.6]

$$\begin{aligned} \hat{V}_{12} &= \hat{\alpha} + \hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_2 && (8.5.19a) \\ &= \hat{\gamma} + \hat{\delta}\hat{\mathbf{T}}^2 && (8.5.19b) \\ &= \hat{\lambda}\hat{P}^{(3)} + \hat{\omega}\hat{P}^{(1)} && (8.5.19c) \end{aligned}$$

(videti (7.3.13)-(7.3.14b)), gde su $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$, $\hat{\gamma}$, $\hat{\delta}$, $\hat{\lambda}$ i $\hat{\omega}$ operatori u ukupnom dvonuklaenskom prostoru stanja koji deluju trivijalno u $\mathcal{H}_1^{(t)} \otimes \mathcal{H}_2^{(2)}$; $\hat{\tau}_1$ je operator koji je u standardnom bazisu u $\mathcal{H}_1^{(t)}$ reprezentovan vektorskom matricom $\boldsymbol{\tau}_1$ itd.; a $\hat{P}^{(3)}$ i $\hat{P}^{(1)}$ su tripletni odnosno singletni svojstveni projektor od $\hat{\mathbf{T}}^2$ (projektuju na $\mathcal{V}(T = 1)$ odnosno na $\mathcal{V}(T = 0)$ sa Crteža C 8.3).

Zadatak 8.5.3 Objasniti kako (8.5.19.c) sledi iz opšte teorije "ormara sa fiokama" kada se svaki kvadratić na Crtežu C 8.3 zameni sa direktnim proizvodcm od $\mathcal{H}_1^{(o)} \otimes \mathcal{H}_1^{(s)} \otimes \mathcal{H}_2^{(o)} \otimes \mathcal{H}_2^{(s)}$ i pravca koji je tim kvadratićem predstavljen (tj. kada se ukupni dvonukleonski prostor ortogonalno dekomponuje u višestruke ireducibilne invarijantne potprostore za $\hat{\mathbf{T}}$).

Vidimo iz (8.5.17a) i (8.5.17c) i iz (8.5.19c) da $p - p$ sistem i $n - n$ sistem "osećaju" samo tripletnu interakciju $\hat{\lambda}\hat{P}^{(3)}$ dok na $p - n$ sistem, koji je

$$|\, p \rangle \,|\, n \,\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|\, 10 \,\rangle + |\, 00 \,\rangle), \qquad (8.5.20)$$

deluje i tripletna $\hat{\lambda}\hat{P}^{(3)}$ i singletna $\hat{\omega}\hat{P}^{(1)}$ interakcija. Tako je moguće da postoji deuteron — vezano s tim je $p - n$ sistema, a ne postoji vezani $p - p$ ili $n - n$ sistem. (U § 7.3.7 istu činjenicu

[8.5.6]Obratiti pažnju da u slučaju spina termin "interakcija nezavisna od spina" znači da dotični operator deluje trivijalno u $\mathcal{H}_1^{(s)} \otimes \mathcal{H}_2^{(s)}$, a analogon od (8.5.19$a$) se naziva skalarnom spinski zavisnom interakcijom (uporediti § 7.3.3). U slučaju izospina, međutim, interakcija (8.5.19) se naziva "nezavisnom od naboja" (jer naboj razlikuje proton od neutrona, a izorotacija (8.5.15) — sa kojom operator interakcije komutira — prevodi $|\, p \,\rangle$ u $|\, n \,\rangle$ i obratno).

sveli smo na Pauli-jev princip, anticipirajući. Tu nema protivurečnosti, za jezgra važi prošireni Pauli-jev princip, a u okviru njega važe zaključci ovog paragrafa.)

Izorotacija koja pretvara p u n i obratno u dvonukleonskom prostoru je $\hat{U}_{12}^{(t)}(\pi\mathbf{x}_1)$. Iz postulirane "nezavisnosti" čisto nuklearne interakcije $\hat{V}_{12}$ od "naboja" sledi (kao specijalni slučaj od (8.5.8b)):

$$[\ \hat{U}_{12}^{(t)}(\pi\mathbf{x}_1), \hat{V}_{12}\ ] = 0. \tag{8.5.21}$$

To je tzv. *simetričnost čisto nuklearne interakcije u odnosu na naboj* (*charge symmetry* na engleskom).

Dvonukleonski hamiltonijan može da se napiše na jeziku identičnih čestica (pri tome se gravitaciona i slaba interakcija izostavljaju). Ideja vodilja je da se na primer iskaz "proton je mase m_p" zameni iskazom "nukleon koji se nalazi u protonskom stanju", u kome ima masu m_p.

Projektor na protonsko i na neutronsko stanje u $\mathcal{H}_t$ glase:

$$\hat{P}_p \stackrel{\text{def}}{=} |\ p\rangle\langle p\ | = \frac{1}{2}(\hat{I}_t + \hat{\tau}_3),\ \ \hat{P}_n \stackrel{\text{def}}{=} |\ n\rangle\langle n\ | = \frac{1}{2}(\hat{I}_t + \hat{\tau}_3). \tag{8.5.22}$$

Zadatak 8.5.4 Dokazati ovaj iskaz.

Pomoću (8.5.22) možemo pomenuti hamiltonijan $\hat{H}_{12}$ dva nukleona da pišemo u vidu

$$\hat{H}_{12} = \sum_{i=1}^{2}(\frac{1}{2m_p}\hat{P}_i^{(p)} + \frac{1}{2m_n}\hat{P}_i^{(n)})\hat{\mathbf{p}}_i^2 + \hat{V}_{12} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\hat{P}_i^{(p)}\hat{P}_i^{(c)} \tag{8.5.23}$$

(naravno, prostor stanja je $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1)\otimes\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_2)\otimes\mathcal{H}_{12}^{(s)}\otimes\mathcal{H}_{12}^{(t)}$, a $\hat{P}_1^{(p)}$, na primer, znači $\hat{P}_p$ u $\mathcal{H}_1^{(t)}$ itd.).

Treba zapaziti da prvi i treći sabirak nisu kompatibilni sa $\hat{\mathbf{T}}$, samo drugi jeste.

Zadatak 8.5.5 Objasniti kako se prvi i treći sabirak u (8.5.23) mogu (preko (8.5.22)) svesti na ireducibilne tenzorske operatore u odnosu na grupu izorotacija. Onda se pomoću Wigner-Eckart-ovog teorema (za izorotacije) mogu lako računati matrični elementi od pomenutih sabiraka u (8.5.23).

8.5.5 Analogna stanja jezgara i izobare

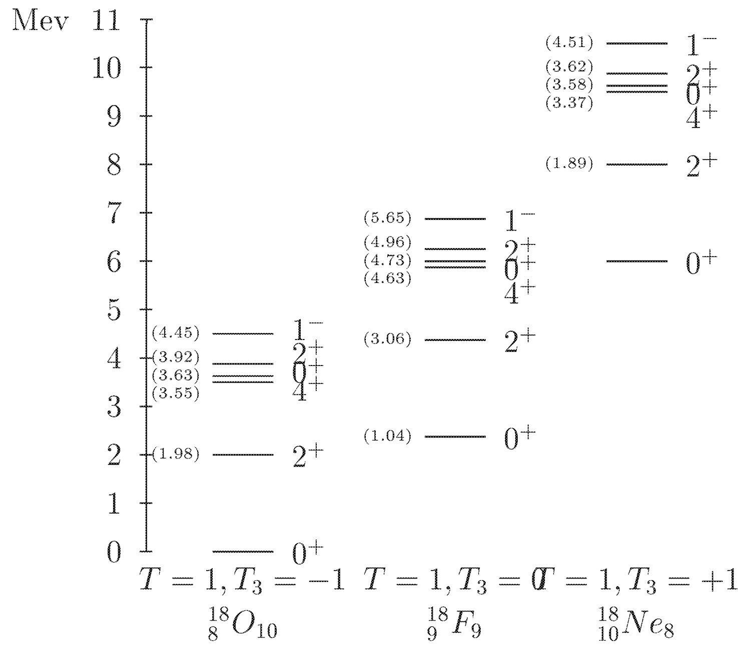
U nuklearnoj fizici je uobičajano da se ukupan broj nukleona obeležava sa A, broj protona sa Z, a broj neutrona sa N. Lako se vidi da usled aditivnosti opservable $\hat{T}_3$, za svako jezgro imamo

$$T_3 = \frac{1}{2}(Z - N) = Z - \frac{1}{2}A, \tag{8.5.24}$$

a izospinsko stanje jezgra odredjeno sa $\hat{T}_3$ (i drugim izospinskim kvantnim brojevima) je element u direktnom proizvodu od A prostora $\mathcal{H}_t$.

Imajući u vidu aditivnost vektorske opservable izospina $\hat{\mathbf{T}}_d = \sum_{i=1}^{A}\hat{\mathbf{t}}_i$ za jezgro, pitamo se da li bi pojedina stanja jezgara mogla imati pored odredjenog $\hat{T}_3$ i odredjenu vrednost T.

Strogo uzev, odgovor je negativan, jer i Coulomb-ova interakcija i kinetička energija nisu nezavisne od naboja. Medjutim, pošto dominantni deo $\hat{V}_{12}$ u interakciji $\hat{H}_{12}$ ((8.5.23) gore) kompatibilan sa
hbT^2, ispostavlja se da su odredjene vrednosti od T prisutne u nekim nuklearnim stanjima kao



Slika 8.4: **Analogna stanja.**

približno dobri kvantni brojevi (uporediti § 8.3.9). Tu se radi o superpozicijama svojstvenih vektora od $\hat{\mathbf{T}}^2$ u kojima jedan sabirak dominira po kvadratu modula svog razvojnog koeficijenta. Drugim rečima, kada bismo merili opservablu $\hat{\mathbf{T}}^2$ u takvom stanju, dobili bismo odredjenu vrednost kvantnog broja T sa verovatnoćom koja je gotovo jednaka jedinici.

Tako nuklearna stanja možemo svrstati u izomultiplete koij se nazivaju *analognim stanjima.* Tu spadaju i osnovna i pobudjena stanja. Članove izomultipleta ili analogna stanja karakteriše isti ukupni uglovni moment jezgra J i ista parnost[8.5.7] π (piše se kratko J^π).

Analogna stanja su stanja jezgara sa istim A, tj. jezgara koja se nazivaju *izobarama* (analogna stanja pripadaju istom A-nukleonskom prostoru stanja). Pošto je kvantni broj približno dobar, očekujemo približno jednake vrednosti energetskih nivoa za analogna stanja; razlika može da potiče samo od Coulomb-ove interakcije i od kinetičke energije.

Primer analognih stanja dat je na Crtežu C 8.4. Oznake jezgara se pišu, na primer, kao ${}^{A}_{Z}O_N$. Na Crtežu C 8.4 su za ${}^{18}_{9}F_9$ prikazani samo izotripletni nivoi, a izosingletni su izostavljeni (medju njih spada i osnovno stanje). Kao što je rečeno, analogni nivoi imaju pored istog T, isto J^π. Brojke u zagradama su energije pobudjenja (tj. razlike energije dotičnog nivoa i energije osnovnog stanja) i to u MeV.

Upadljiva analogija izotripletnih nivoa kod ${}^{18}O$, ${}^{18}F$ i ^{18}He jasno pokazuje koliko relevantno pribžni kvantni broj T karakteriše strukruru u pojedinim stanjima jezgara.

Potrebno je istaći da činjenica što je osnovno stanje jezgra ${}^{18}_{9}F_9$ izosingletno nije slučajnost. Videli smo da i deuteron ima osnovno (i jedino) stanje izosingletno. Tu se radi o tzv. *samokonjugovanim* (engleski: *self-conjugate*, čitati: selfkondžuget) jezgrima, tj. o jezgrima sa $Z = N$. Takozvanom *ogledalnom konjugacijom* jezgru sa (Z, N) pridružujemo jezgro sa $(Z' = N, N' = Z)$

[8.5.7] π je ovde ukupna prostorna parnost jezgra. Unutrašnje parnosti (u spinskom prostoru) su uvek +1 za p i za n (uporediti Tabelu više).

(tj. uzajamno zamenimo Z i N). Pomenuta dva jezgra su, kao što se kaže, uzajamno *ogledalna jezgra* (engleski: *mirror nuclei*, čitati: mire njukliaj). Samo-konjugovana su jezgra koja su sama sebi ogledalna.

Samo-konjugovana jezgra imaju $T_3 = 0$, te osnovno stanje može da ima izospin $T = 0, 1, 2, \ldots$. Ispostavlja se da izosingletni deo interakcije daje najviše vezivanja, tj. da je $T = 0$ energetski povoljnije i stoga nužno karakteristično za osnovno stanje (koje je, po definiciji, energetski najniže, tj. najjače vezano).

Zadatak 8.5.6 Pokazati da se ogledalna konjugacija A-nukleonskog sistema može izvršiti izorotacijom:

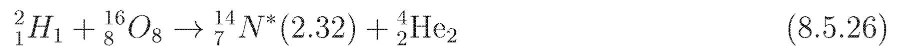
$$\hat{U}^{(t)}_{1\ldots A}(\pi\mathbf{x}_1) \stackrel{\text{def}}{=} \otimes_{i=1}^{A} \hat{U}^{(t)}_i(\pi\mathbf{x}_1). \tag{8.5.25}$$

Zadatak 8.5.7 Kakvo se empirijsko pravilo može izvući iz činjenica da samo-konjugovana jezgra (kao ${}^{18}_{9}F_9$ i ${}^{2}_{1}H_1$) imaju osnovno stanje izosingletno, a ${}^{18}_{8}O_{10}$ i ${}^{18}_{8}Ne_8$ imaju osnovno stanje izotripletno?

Pošto je izospin u jezgrima blisko povezan sa izobarama, ponekad se izospin naziva i izabarnim spinom (uglavnom u nuklearnoj fizici). Postoji i jedan stariji naziv, koji, po svoj prilici, potiče od brkanja izobara i izotopa, po kome se izospin naziva izotopski spinom[8.5.8].

8.5.6 Selekciona pravila i odnosi preseka nuklearnih reakcija

Kao ilustraciju za selekciono pravilo izospina proučimo nuklearnu reakciju



$$ {}^{2}_{1}H_1 + {}^{16}_{8}O_8 \to {}^{14}_{7}N^*(2.32) + {}^{4}_{2}\mathrm{He}_2 \tag{8.5.26}$$

(prelaz 18-nukleonskog sistema s LS-e u 18-nukleonski sistem na DS-i). Sva četiri jezgra u (8.5.26) su samo-konjugonana, te u osnovnom stanju imaju izosingletno stanje. Medjutim, kao što zvezdica indicira, ${}^{14}N$ je u pobudjenom stanju (energija pobudjenja je 2.32Mev) i utvrdjeno je da je to izotripletno stanje. Dakle, LS ima ukupni izospin $T = 0$, a DS ukupni izospina $T = 1$. Radi se, kao što se kaže, o,$\Delta T = +1$ prelazu. Na prvi pogled, trebalo bi da je verovatnoća ovog prelaza nula, jer $\langle\, T = 0 \mid T = 1 \rangle = 0$.

Ipak, zabrana reakcije (8.5.26) je samo približno selekciono pravilo. Ova reakcija se dešava u prirodi, ali retko. Stvara se tzv. intermedijerno visoko-pobudjeno stanje od ${}^{18}_{9}F^*_9$ u kome se pojavljuje oko 4% izospinske "nečistoće", tj. koherentne primese stanja sa kvantnim brojem $T = 1$ uz dominantno stanje sa $T = 0$. Tako se pojavljuje mogućnost ili, kao što se kaže, otvara se kanal $T = 1$, koji omogućuje raspad ${}^{18}F^*$ na DS-u od (8.5.26).

Zadatak 8.5.8 Pokazati da za parno A izorotacija $\hat{U}^{(t)}_{1\ldots A}(\pi\mathbf{x}_1)$ je involucija, prema tome i opservabla. Šta je sa neparnim A ?

Svojstvene vrednosti ± 1 od $\hat{U}^{(t)}_{1\ldots A}(\pi\mathbf{x}_1)$ nazivaju se *parnošću naboja* (engleski: *charge parity*). Ispostavlja se da samo-konjugovana jezgra u osnovnom stanju uvek imaju parnost naboja $+1$, a pobudjeno jezgro ${}^{14}N^*(2.32)$, na primer, ima parnost naboja -1.

[8.5.8] "Izobare" su, u prevodu sa grčkog, "jednako teška jezgra, dok su izotopi jezgra "na istom mestu" (periodnog sistema). Pošto u izomultiplet spadaju izobare, a ne izotopi, termin "izotopski spin" je neispravan i treba ga izbegavati.

Zadatak 8.5.9 Pokazati da je nuklearna reakcija (8.5.26) zabranjena (približno) i u pogledu parnosti naboja, a to znači korišćenje samo izorotacije $\hat{U}^{(t)}_{1\ldots A}(\pi \mathbf{x}_1)$ umesto cele izorotacione grupe kao približne simatrije hamiltonijana.

Zadatak 8.5.10 Kakvo selekciono pravilo važi za nuklearnu reakciju



$$ {}^6_3Li_3 + {}^4_2\mathrm{He} \rightarrow {}^6_3Li^*_3(3.56) + {}^4_2\mathrm{He}_2 \qquad (8.5.27)$$

ako se zna da je ${}^6Li^*(3.56)$ izotripletno stanje?

Zadatak 8.5.11 Zašto u nuklearnim reakcijama (8.5.26) i (8.5.27) ne vodimo računa pored T i o $\hat{T}_3$?

Verovatnoća odredjene reakcije izražava se preciznije kao tzv. (poprečni) presek σ. Iz simetrija nije moguće izračunati presek u potpunosti, ali mogu se dobiti *relativni odnosi* nekih preseka.(tzv. odnosi grananja, engleski: *branching ratios*, čitati: brančing rejšios).

Objasnićemo to na primeru sledeća dva kanala do kojih dovodi sudar deuterona sa ${}^9Be$.



$$ {}^2_1H_1 + {}^9_4Be_5 \rightarrow {}^{10}_5B(1.74) + n, \qquad (8.5.28a)$$



$$ {}^2_1H_1 + {}^{10}_4Be_6 \rightarrow {}^{10}_4Be_6 + p, \qquad (8.5.28b)$$

Jezgra ${}^9Be$ i ${}^{10}Be$ nisu samo-konjugovana, ali i njihovo osnovno stanje ima najmanju moguću vrednost od T (uporediti Zadatak Z8.5.7). Pošto je $T_3 = -\frac{1}{2}$ odnosno $T_3 = -1$, to je $T = \frac{1}{2}$ odnosno $T = 1$. Stanje ${}^{10}B^*(1.74)$ jezgra bora ima $T = 1$. Prema tome, LS-a u (8.5.28) ima $t = \frac{1}{2}$, a DS-a od (8.5.28) ima koherentnu smešu od $T = \frac{1}{2}$ i $T = \frac{3}{2}$. U aproksimaciji izospina obe reakcije su moguće samo kroz kanal $T = \frac{1}{2}$. Pitanje je kakav je njihov relativni udeo u tom kanalu.

Pošto LS-a ima kvantne brojeve $T = \frac{1}{2}$, $T_3 = -\frac{1}{2}$, pretpostavimo da su to i kvantni brojevi intermedijernog stanja ${}^{11}_5B^*_6$, pisaćemo ga kao $T = \frac{1}{2}$, $T_3 = -\frac{1}{2}$. Onda u pogledu izospinskih kvantnih brojeva DS-e u (8.5.28a) i (8.5.28b) su sabirci sledeće formule (i to na njenoj DS-i):

$$ \mid T = \frac{1}{2}, T_3 = -\frac{1}{2}\rangle = (1,\frac{1}{2},0,-\frac{1}{2}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}) \mid t^{(3)}_1 = 0, t^{(3)}_2 = -\frac{1}{2}\rangle + (1,\frac{1}{2},-1,\frac{1}{2}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}) \mid t^{(3)}_1 = -1, t^{(3)}_2 = \frac{1}{2}\rangle, \qquad (8.5.29)$$

gde je $t^{(3)}_1$ u prvom sabirku treća komponenta izospina za ${}^{10}B^*$, $t^{(3)}_2$ je isto za n ; u drugom sabirku, je $t^{(3)}_1$ isto za ${}^{10}Be$, $t^{(3)}_2$ je isto za p. Razvojni koeficijenti su C-G koeficijenti.

Verovatnoća da se u merenju dobije prvi ili drugi sabirak u (8.5.29) (tj. kanal (8.5.28a) ili kanal (8.5.28b)) jednaka je (što se izospina tiče) kvadratu modula razvojnog koeficijenta. Prema tome, pretpostavljajući da su prostorno-spinski ova dva kanala jednako verovatna, odnos njihovih verovatnoća jednak je odnosu kvadrata odgovarajućih razvojnih, tj. C-G koeficijenata. Pošto su $(1,\frac{1}{2},0,-\frac{1}{2} \mid \frac{1}{2},-\frac{1}{2}) = \sqrt{\frac{1}{3}}$, $(1,\frac{1}{2},-1,\frac{1}{2}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}) = -\sqrt{\frac{2}{3}}$, imamo

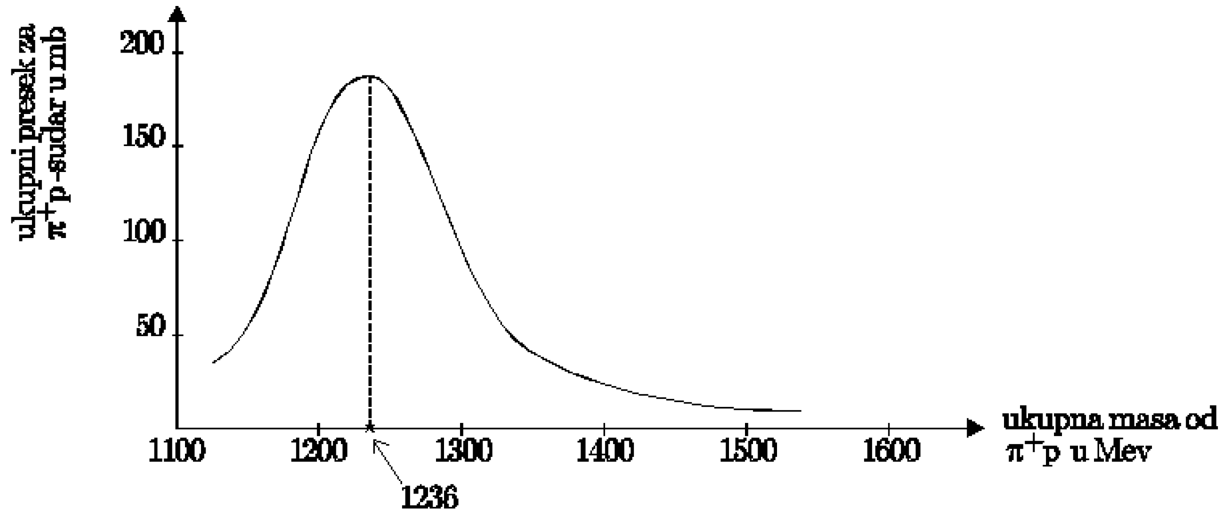
$$\frac{\sigma({}^{10}B^* + n)}{\sigma({}^{10}Be + p)} = \frac{1}{2}. \qquad (8.5.30)$$

8.5.7 Izospin rezonanci i izospin u hadronskim procesima

U vreme pisanja ovog udžbenika najnovija istraživanja sve više ukazuju na to da postoji prilična sličnost izmedju unutrašnje strukture hadrona i jezgara. Eksperimentalno još nisu otkrivene materijalne čestice, koje bi sačinjavale hadrone, ali teorija ih predvidja i naziva kvarkovima,

partonima itd. Teorijski se proučava ideja da se model ljuski (videti § 7.3.6) realizuje i u hadronskoj, strukturi. Mi nećemo ulaziti u ovu materiju osim što ćemo ukazati na postojanje kratkoživućih pobudjenih stanja hadrona, tzv. *rezonanci*. Nastaju pod odredjenim uslovima pri odredjenim energijama sudara u izvesnoj sličnosti sa specifičnim frekvencama klasičnih objekata i sa oscilatornim rezonancama koje u vezi s tim mogu da nastupe (otud naziv).

Nas, naravno, prvenstveno zanima uloga izospina u klasifikaciji stanja ili u klasifikaciji energetskih nivoa hadrona. Kao što prikazuje Crtež C 8.5, prilikom bombardovanja vezanih *protona sa pozitivnim pionima*, pri odredjenoj energiji (oko 1236 MeV) nastaje izraziti *peak* (čitati: piik; na engleskom znači vrh) u veličini ukupnog poprečnog preseka[8.5.9].



Slika 8.5: **Rezonanca** $\Delta^{++}(1236)$**.** *Eksperimentalni rezultati za ukupni efikasni presek bombardovanja vezanih protona pionima.*

Rezonanca sa Crteža C 8.5 označava se sa $\Delta^{++}(1236)$. Pored energije, ostali kvantni brojevi su joj: $s = \frac{3}{2}$, $\pi_s = +1$, $t = +\frac{3}{2}$, $t_3 = +\frac{3}{2}$.

Zadatak 8.5.12 A)Kako je moglo doći do spina $\frac{3}{2}$? B) Pokazati da su kvantni brojevi $t = \frac{1}{3}$, $t_3 = \frac{1}{3}$ nužni za $\pi^+ + p \to \Delta^{++}(1236)$.

Rezonanca $\Delta^{++}(1236)$ je član[8.5.10] izomultipleta $\Delta(1236)$.

Zadatak 8.5.13 U kojim sudarima nastaju ostala tri člana pomenutog izokvadrupleta? U kojima od tih sudara postoji samo jedan, a u kojima postoje dva izospinska kanala? Koji su električni naboji pojedinih rezonanci u izokvadrupletu?

[8.5.9]"Ukupni" ili "totalni" poprečni presek odnosi se na verovatnoju dotičnog dogadjaja ($\pi^+ p$ – sudara) i to tako da se uključuje kako tzv. elastično rasejanje (kada nakon sudara ostaju iste čestice sa istim energijama, samo eventualno pod promenjenim uglom), neelastično rasejanje (kad čestice ostaju iste ali se energije promene) i hadronski proces (kada se čestice menjaju) i to uključujući sve moguće uglove izlazne čestice. Jedinica za presek je milibarn: mb.

[8.5.10]Detaljnije o elementarnim česticama sa gledišta nerelativističke kvantne mehanike u odlično pisanoj knjizi: S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, J. Wiley, New York, 1974.

Zadatak 8.5.14 Na osnovu gornje tabele pokazati koje od sledeća četiri hadronska procesa zabranjuje selekciono pravilo izospina:

$$\pi^- + n \to \Omega^- + \pi^0,\ \pi^- + n \to \Lambda^0 + \pi^0, \tag{8.5.31a,b}$$

$$K^- + n \to \Xi^- + \pi^0,\ \Xi^- \to \Lambda^0 + \pi^-. \tag{8.5.31c,d}$$

Zadatak 8.5.15 U analogiji sa (8.5.29) objasniti jednakost

$$|\,\Delta^+\,\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,\pi^0 p\,\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|\,\pi^+ n\,\rangle. \tag{8.5.32}$$

i na osnovu nje izvesti da je 2:1 relativni odnos preseka sledeće dve reakcije:

$$\Delta^+ \to p + \pi^0,\ \Delta^+ \to n + \pi^+. \tag{8.5.33a,b}$$

8.6 * SU(3) simetrija hadrona

Postulat o unutrašnjim stepenima slobode § 6.9.6 nam je otvorio put za konstrukciju spinskog i izospinskog faktor prostora najvažnijeg hadrona, nukleona. Međutim, ispostavlja se da čak ni $\mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_t$ nije dovoljno obuhvatan i na može se smatrati ukupnim prostorom za hadron. Do ovog saznanja dovelo je otkriće teških bariona, tzv. hiperona, kao i teških mezona (tj. kaona). Osobine ovih čestica bile su strane tadašnjim shvatanjima fizičara i izazvale su veliko iznenađenje.

Kada su strane čestice, kako su nazvani pomenuti novi hadroni, dopunili listu mezona i bariona, pokazalo se da kako sama egzistencija baš ovih čestica (upravo sa osobinama kakve imaju) tako i njihove transmutacije u uzajamnim sudarima ili u pojedinačnim raspadima odaju postojanje jedne dublje i sveobuhvatnije unutrašnje simetrije koja se označava sa SU(3). Nametnula se ideja modela kvarkova, ali kvarkovi do danas nisu eksperimentalno otkriveni.

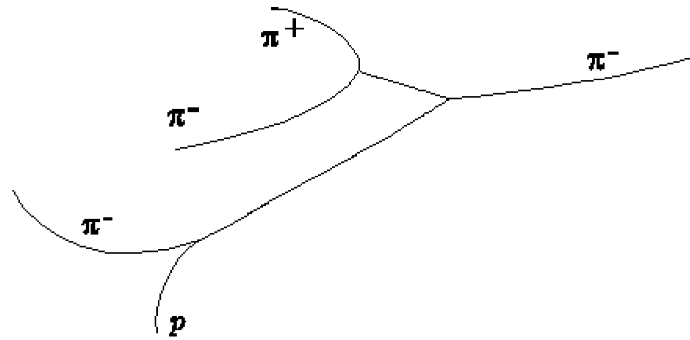
8.6.1 Otkriće čudnih novih čestica, stranost i hipernaboj

U Tabeli Tb 8.1 u prethodnom odeljku videli smo tabelu osnovnih hadrona sa kompletnim skupom njihovih unutrašnjih kvantnih brojeva. To je u skladu sa našim deduktivnim metodom ekspozicije, ali to lišava čitaoca da makar i delimično učestvuje u uzbuđenjima koja su fizičari proživljavali na induktivnom putu otkrića novih hadrona i njihovih osobina. Zato ćemo u ovom odeljku posvetiti nešto pažnje i istorijsko-idejnom razvoju događaja.

U 1947. godini od hadrona su bili poznati samo pioni i nukleoni. Ali do tada su i najjači akceleratori (tj. ubrzivači čestica) ubrzavali na primer protone najviše do 200 MeV kinetičke energije. U narednih osam godina je akcelerator u Berkeley-u[8.6.1], u SAD dostigao 6000 MeV (ili, kako se kraće kaže 6 BeV ili biliona elektron volti, ili 6 GeV, giga elektron volti — dotični akcelerator se naziva bevatronom). Nastao je buran period otkrića novih čestica: kaona, lambda-, sigma- i ksi-hiperona.

Jedan tipičan niz procesa u kojima nastaju i nestaju neutralne čestice K^o i Λ^o prikazan je na Crtežu C 8.6 na način kako se vidi po tragovima u Wilson-ovoj komori. U prezasićenoj pari komore svaka naelektrisana čestica izaziva kondenzovanje kapljica duž svoje trajektroije, koja se, usled ugrađenog magnetnog polja, zakrivljuje više ili manje prema tome da li je impuls čestice

[8.6.1] Čitati: Berkli.



Slika 8.6: **Tragovi čestica u Wilson-ovoj komori**.

manji ili veći. (Ovde imamo istovremeno merenje položaja i impulsa u smislu objašnjenja u § 4.1.8.) Isprekidane crte (za K^o i Λ^o) se ne vide u komori, jer neutralne čestice ne izazivaju kondenzaciju. Zakrivljenost nagore odaje negativan električni naboj itd. Šta se u stvari dešava u tačkma račvanja prikazano je u (8.6.1a)-(8.6.1c) (Λ^o je isto što i Λ iz Tabele Tb 8.1; čitati crtež s desna u levo).

$$\Pi^- + p \rightarrow K^o + \Lambda^o \quad (\overline{\tau} \sim 10^{-23}\,\mathrm{s}), \tag{8.6.1a}$$

$$K^o \rightarrow \Pi^+ + \Pi^- \quad (\overline{\tau} \sim 10^{-10}\,\mathrm{s}), \tag{8.6.1b}$$

$$\Lambda^o \rightarrow p + \Pi^- \quad (\overline{\tau} \sim 10^{-10}\,\mathrm{s}). \tag{8.6.1c}$$

Zadatak 8.6.1 Ako znamo da su barionski brojevi B za nukleone i pione dati podacima iz Tabele Tb 8.1, kakav se B pripisuje česticama K^o i Λ^o na osnovu održanja ukupnog barionskog broja u procesima (8.6.1a)-(8.6.1c)?

Verovatnoća nekog procesa je srazmerna jačini interakcije koja do njega dovodi. Stoga iz reda veličine srednjeg života (veličine obrnuto srazmerne verovatnoći) u procesima (8.6.1a)-(8.6.1c) vidimo da čestice K^o i Λ^o nastaju jakom, a raspadaju se slabom interakcijom. Fizičarima je neko vreme izgledalo čudno što se nove čestice (kao K^o i Λ^o), iako mogu da interaguju jakom interakcijom, raspadaju samo usled slabe interakcije. Šta li ih to sprečava da se raspadnu jakom interakcijom — pitali su se — koji li se to unutrašnji kvantni broj održava u jakoj i elektromagnetnoj interakciji, tako da za neke procese (kao (8.6.1b) i (8.6.1c)) preostaje samo mogućnost slabe interakcije za raspadanje (koja, po svoj prilici narušava dotični kvantni broj). A i stvaranje novih čestica u parovima kao u (8.6.1a), tzv. asocirana produkcija, se redovno opažalo u takvim procesima i tražilo je objašnjenje.

Nove čestice su nazvane *stranim* (ili čudnim) *česticama*[8.6.2]. Godine 1953. Gell-Mann[8.6.3] iz SAD i nezavisno od njega Nishijima[8.6.4] iz Japana predložili su da se pojam izospina i nezavisnost jake interakcije od naboja proširi i na strane čestice. Tako je nastala kolona izospina (t, t_3) u Tabeli Tb 8.1 i forma Postulata II.B (paragraf § 8.5.2).

[8.6.2]Engleski: *strange particles*; čitati streindž partikls.
[8.6.3]Čitati kao što piše.
[8.6.4]Čitati: Nišidžima.

Zadatak 8.6.2 Prodiskutovati procese (8.6.1*a*)-(8.6.1*c*) sa gledišta održanja $\hat{\mathbf{T}}$ u jakoj i neodržanja ni $\hat{\mathbf{T}}^2$ ni $\hat{T}_3$ u slaboj interakciji.

Kao što smo već postulirali u (8.5.6), ispostavilo se da je

$$\hat{S} \stackrel{\text{def}}{=} 2\,(\hat{Q} - \hat{T}_3) - \hat{B} \tag{8.6.2}$$

aditivna superselekciona opservabla, čije se (celobrojne) svojstvene vrednosti (tj. kvantni brojevi) S nazivaju *stranost*. Kao što izriče Postulat II.B (paragraf § 8.5.2), jaka i elektromagnetna interakcija održavaju T_3, a prema tome (pošto se Q i B univerzalno održavaju) održavaju i S. Slaba interakcija narušava T_3 i S.

Zadatak 8.6.3 Potvrditi važenje poslednjeg iskaza u procesima (8.6.1*b*) i (8.6.1*c*).

Često se umesto stranosti koristi jedan drugi, stranosti ekvivalentan kvantni broj, tzv. *hipernaboj*, koji se označava sa Y. I to su (celobrojne) svojstvene vrednosti (tzv. kvantni brojevi) jedne opservable $\hat{Y}$, koja je po definiciji

$$\hat{Y} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{B} + \hat{S}. \tag{8.6.3}$$

Očigledno je i $\hat{Y}$ aditivna opservabla, koja je i superselekciona što se tiče jake i elektromagnentne interakcije.

Zadatak 8.6.4 *(i)* Dopuniti Tabelu Tb 8.1 kolonom vrednosti od Y.

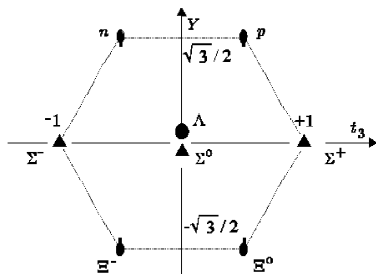
(ii) Koja vrednost S i Y odgovara jezgru deuterijuma i helijuma ^{4}He ?

(iii) Da li u pobuđenom stanju od ^{4}He može Y da ima drugu vrednost nego u osnovnom stanju?

8.6.2 Supermultipleti hadrona

Na Crtežu C 8.7 poređani su svi osnovni hadroni (osim Ω^-) po uglovima i (dva) u centru šestougaonika tako da su im koordinate $x \stackrel{\text{def}}{=} t_3$, $y \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sqrt{3}}{2}Y$. Oni čine jedan tzv. *supermultiplet*, tj. širi skup koji se sastoji od nekoliko (u stvari od 4) izomultipleta.

Zadatak 8.6.5 Utvrditi pomoću Tabele Tb 8.1 koje su zajedničke unutrašnje osobine svih hadrona u pomenutom supermultipletu, a koje su dodatne zajedničke osobine hadrona u pojedinim izomultipletima unutar istog supermultipleta. Po čemu se Ω^-, koji ne pripada tom supermultipletu, razlikuje od svih hadrona iz supermultipleta?



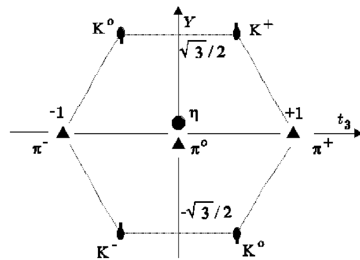
Slika 8.7: **Supermultiplet osnovnih hadrona.**

Hadroni koji pripadaju istom *izomultipletu* na Crtežu C 8.7 razlikuju se po masi za oko 1 % (svoje mase). Očigledno tu se radi o jednom približno degenerisanom energetskom nivou hadrona, a razlike potiču od elektromagnetne interakcije. Ona doduše održava $\hat{T}_3$, ali ne održava $\hat{T}_\pm$ (analogone od $\hat{K}_\pm$); stoga energetski nivoi imaju određeno t_3, ali funkcionalno zavise od njegove vrednosti.

Sličnu pojavu imali smo u Zeeman-ovom efektu. Tu se *a priori* sferna simetrija strukture elektronskog omotača (tj. njegovog

hamiltonijana) suzila na aksijalnu (ili cilindričnu) simetriju magnetnog polja $\mathbf{B}$. Ukupni hamiltonijan je i dalje bio kompatibilan sa $\hat{J}_z$, ali nije komutirao sa $J_\pm$ i zbog toga smo dobili cepanje energetskog nivoa (koji odgovara $\mathbf{B} = 0$) i to na $2J+1$ različitih nivoa, koji odgovaraju stanjima u rotacionom multipletu $\{|\, J, M = -J\,\rangle, \dots, |\, J, M = J\,\rangle\}$.

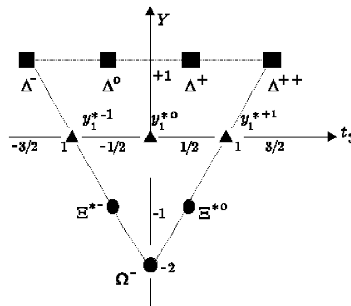
Ako pogledamo mase hadrona koji se nalaze u različitim izomultipletima, a pripadaju istom supermultipletu na Crtežu C 8.7, vidimo da masene razlike između izomultipleta iznose oko 10 %.



Slika 8.8: **Hadronski** K-**supermultiplet.**

Primamljivo je zamišljati sve hadrone supermultipleta kao približno degenerisana hadronska stanja kojima u (zamišljenom) odsustvu članova u hamiltonijanu koji narušavaju simetriju odgovara jedan jedinstven degenerisan energetski nivo[8.6.5].

Supermultiplete su prvi uočili Ne'eman[8.6.6] i Gell-Mann 1961. odnosno 1962. godine. Nazvali su svoje svrstavanje *osmostrukim putem* (*the eightfold way*[8.6.7]).



Slika 8.9: **Hadronski** Ω^- **supermultiplet.**

Iako smo u prethodnom odeljku SU(2) grupi izospina dali neposredni smisao samo u izospinskom faktor prostoru stanja $\mathcal{H}_t$ nukleona, stoji matematička činjenica da svaka vrednost t definiše jednu ireducibilnu reprezentaciju za SU(2), analogno kao što svaka vrednost od J je određen kvantni broj za R(3). Stoga, isto kao što se za sve moguće vrednosti J sistemâ kaže da je posredi jedna te ista rotaciona simetrija R(3), za sve izomultiplete, tj. za sve vrdnosti od t kod različitih hadrona, kaže se da se radi o SU(2) simetriji izospina. Drugim rečima, izomultipleti su pripisani SU(2) simetriji hadrona kao što se rotacioni multipleti pridružuju rotacionoj simetriji elementarne čestice ili višečestičnog sistema.

Fizičari su tražili jednu nadgrupu od SU(2) grupe izospina (kao što je R(3) nadgrupa od grupe vrtnji oko z ose), čiji bi kvantni brojevi definisali pojedine supermultiplete (videti Crtež C 8.8, na kojem je prikazan još jedan supermultiplet).

U početku se zamišljalo da bi pomenuta nadgrupa bila grupa simetrije jake interakcije, te bi od jake interakcije poticala vrednost pomenutog degenerisanog nivoa. Interakcija koja bi narušavala dotičnu simetriju bi morala biti uzrok pomenutih razlika masa od 10 %; znači morala bi po jačini da bude između jake i elektromagnetne interakcije (koja daje 1 % razlike u masi). Pretpostavilo se da postoji tzv. srednje jaka interakcija, koja bi dinamički zasnivala ulogu pomenute nadgrupe simetrije u klasifikaciji hadrona. Međutim, postojanje srednje jake interakcije do danas nije dokazano i danas se više naginje pretpostavci da je pomenuta nadgrupa u stvari samo približna grupa simetrije jake interakcije.

[8.6.5] "Član koji narušava simetriju" se engleski kaže *symmetry breaking term*, čitati: simetri brejking term, znači: član koji lomi simetriju.

[8.6.6] Čitati: Niiman.

[8.6.7] Čitati: di ejtfould vej.

8.6.3 Otkriće omega hiperona

Pre nego što se nešto bliže upoznamo sa pomenutom nadgrupom približne simetrije jake interakcije, pogledajmo još jedan supermultiplet, koji je prikazan na Crtežu C 8.9.

U ovom supermultipletu se zajedno sa raznim rezonancama (pobuđenim stanjima hadrona) nalazi i Ω^- čestica (dakle, osnovno stanje). Ovde imamo sličnost sa nuklearnim izomultipletima čiji su članovi analogna stanja (uporediti Crtež C 8.4). Oni takođe često sadrže i po jedno osnovno stanje.

Otkriće Ω^- hiperona je predstavljalo veliki trijumf teorijske analize. Kao što je nekada Mendeljejev na osnovu praznih mesta u svom periodnom sistemu predskazivao nove hemijske elemente, vodeći fizičari oko sredine našeg stoleća su na osnovu praznog mesta na dnu supermultipleta sa Crteža C 8.9 predskazali postojanje čestice sa $S^{\Pi} = \frac{3}{2}^+$, $B = 1$, $S = -3$, $t = t_3 = 0$ i masom oko $1,5\,\mathrm{BeV}$. Ova čestica (Ω^-) je i eksperimentalno otkrivena 1964. godine i imala je sve predskazane osobine (eksperimentalna masa je odstupala od teorijske ne više od 10 %).

8.6.4 SU(3) simetrija

Kao što smo istakli u paragrafu § 8.6.2, fizičari su bili u potrazi za grupom koja bi dala supermultiplete. Ispostavilo se da u matematici odavno poznata grupa SU(3), tj. specijalna unitarna grupa u 3 dimenzije (tj. skup svih 3×3 kompleksnih unitarnih matrica jedinične determinante) je grupa koja na prirodan način daje supermultiplete, analogno kao što rotaciona grupa R(3) daje rotacione multiplete $\{|\,km\lambda\,\rangle \mid m = -k, \ldots, k\}$.

U grupi SU(3) se može pronaći podgrupa $\mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{U}(1)$ (tzv. direktni proizvod grupa SU(2) i U(1), u kome se svaki element iz prve množi sa svakim iz druge i ovi elementi komutiraju). Grupa U(1) je jedinični krug (u kompleksnoj ravni). U kvantnomehaničkoj primeni nju reprezentuje grupa $\{e^{\imath\lambda\hat{Y}} \mid e^{\imath\lambda} \in \mathrm{U}(1)\}$ (u analogiji sa $\{\hat{U}(\varphi\mathbf{u}) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\varphi\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{K}}} \mid R_{\varphi\mathbf{u}} \in \mathrm{R}(3)\}$), čiji je hermitski generator operator hipernaboja $\hat{Y}$. U grupno-teorijskim metodama kvantne mehanike se analogno pojavljuje U(1) u vezi sa opservablama $\hat{Q}$ i $\hat{B}$ (i opservablom broja čestica u striktno nerelativističkoj kvantnoj mehanici). U ovakvoj ulozi U(1) se naziva *gauge*[8.6.8] *grupom*, tj. grupom baždarenja. U našem slučaju radi se o gauge grupi hipernaboja. Grupa SU(2) se, naravno, odnosi na izospin.

Odnos

$$\mathrm{SU}(3) > \mathrm{SU}(2) \otimes \mathrm{U}(1) \tag{8.6.4a}$$

(kad se radi o grupama onda se relacija inkluzije $\supset$ iz teorije skupova piše kao $>$) je analogan odnosu

$$\mathrm{R}(3) > \mathrm{R}_z(1), \tag{8.6.4b}$$

gde smo sa $\mathrm{R}_z(1)$ obeležili grupu svih rotacija oko fiksirane z ose. Ako se čitalac podseti "ormara sa fiokama" sa Crteža C 6.2, biće mu jasno da su sami ormari, tj. $\mathcal{V}_k$ višestruki ireducibilni potprostori za R(3) karakterisani pojedinim vrednostima kvantnog broja k. "Fijoke", tj. $\mathcal{V}_{km}$ potprostori, su višestruki ireducibilni potprostori (jednodimenzionalni) za $\mathrm{R}_z(1)$. Dakle, $\mathcal{V}_{km}$, karakterisani sa m, su u stvari "ormari" za $\mathrm{R}_z(1)$, samo tu nemamo više od jedne "fioke", jer je $\mathrm{R}_z(1)$ Abel-ova grupa. Pri tome je veoma važno da je "ormar" za $\mathrm{R}_z(1)$ unutar "ormara" za

[8.6.8] Čitati: gejdž.

R(3). Ovo je uvek moguće za tzv. *lance grupa*, kao što su (8.6.4a) i (8.6.4b) (nekad takav lanac ima i više od dva člana).

Sa gledišta lanca grupa (8.6.4b), sâm vektor $\mid km\lambda\,\rangle$ je multiplet (u stvari singlet) za $R_z(1)$, a $\{\mid km\lambda\,\rangle \mid m = -k,\ldots,k\}$ je supermultiplet. Drugim rečima, terminologija "multiplet, supermultiplet" je vezana za posmatranje lanca grupa polazeći od podgrupe idući ka nadgrupi, dakle obratno nego što smo činili u § 6.3 i § 6.4.

Vratimo se na SU(3) grupu. Zamislimo supermultiplet SU(3) grupe kao analogon kolone tačaka na Crtežu C 6.2, a izomultiplete kao analogone pojedinih tačaka u takvoj koloni. Matematički aparat SU(3) grupe raspolaže operatorima koji su analogoni od $\hat{\mathbf{K}}^2$, operatorima koji su analogoni od $\hat{K}_z$, kao i operatorima koji su pandani od $\hat{K}_{\pm}$. Takođe slede jaki iskazi ekvivalentnosti kao za R(3). Naročito je važna ekvivalentnost po "fiokama", iako ona u primeni na hamiltonijan važi samo približno.

Što se tiče analogona višestrukosti d_k, ako se ograničimo na čisto unutrašnji prosotor hadrona, znači ako apstrahujemo $\mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$, onda je $d_k = 1$. Ali u sveukupnom prostoru stanja, naravno, $d_k = \aleph_0$, $\forall k$. To je analogno sa slučajem $\mathcal{L}^2(r,\theta,\phi) = \oplus_{l=0}^{\infty}\mathcal{L}^2(r)\otimes\mathcal{V}_l$ za R(3) (uporediti 6.6.25).

8.6.5 Model kvarkova

Postavlja se pitanje šta u stvari fizički znači SU(3) simetrija i kako je uklopiti u kvantno-mehanički formalizam. Jedna je mogućnost da se radi o unutrašnjem stepenu slobode i da se, u smislu Postulata o unutrašnjim stepenima slobode § 6.9.6, pokuša da se za svaki supermultiplet ponaosob konstruiše odgovarajući unutrašnji faktor prostor. On bi morao biti obuhvatniji od izospinskog prostora $\mathcal{H}_t$, tj. morao bi da bude ortogonalna suma više ireducibilnih potprostora za SU(2), baš kao što se sam supermultiplet sastoji od više izomultipleta.

Skicirani put razmišljanja bi ostavio različite supermultiplete potpuno nepovezanim. Fizičari, povučeni matematičkim osobinama SU(3) grupe, stekli su uverenje da bi trebalo da ova grupa igra jedinstvenu i sveobuhvatnu ulogu u fizici hadrona i rezonanci.

U želji da se stvori jedinstveni model na osnovu SU(3) klasifikacije, pošlo se od pretpostavke da su svi *hadroni* u stvari *složene čestice*, a da postoji šest (još neotkrivenih) fundamentalnih čestica; tri od njih su nazvane *kvarkovima*[8.6.9], a tri antikvarkovima.

Da bi matematičke osobine SU(3) grupe postale jasnije, vratimo se na slaganje dva uglovna momenta. Videli smo u (7.1.11a) da važi

$$\mathcal{V}_1^{(k_1,\lambda_1)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k_2,\lambda_2)} = \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \mathcal{V}_{12}^{(k,\lambda_1\lambda_2)}. \qquad (8.6.5a)$$

Izostavimo dodatne kvantne brojeve λ_1 i λ_2 i umesto kvantnog broja k_1, na primer, pišimo $2k_1+1$ (broj stanja u rotacionom multipletu). Pošto je veza $k_1 \leftrightarrow 2k_1+1$ biunivoka, (8.6.5a) postaje

$$(2k_1+1)\otimes(2k_2+1) = [2|k_1-k_2|+1]\oplus\ldots\oplus[2(k_1-k_2)+1]. \qquad (8.6.5b)$$

U analogiji sa (8.6.5b), u teoriji razlaganja ireducibilnih reprezentacija SU(3) grupe imamo sledeće dve važne formule:

$$3\otimes 3^* = 1\oplus 8, \qquad (8.6.6)$$

[8.6.9] Engleski se piše *quark* i obeležava sa q.

$$3 \otimes 3 \otimes 3 = 1 \oplus 8 \oplus 8 \oplus 10. \qquad (8.6.7)$$

Simbol 3 označava sâmu SU(3) grupu (njen standardni bazis ima tri člana, tj. imamo triplet), 3^* označava tzv. konjugovanu ireducibilnu reprezentaciju od SU(3), koja je neekvivalentna sa 3. Ovaj pojam se kod realne grupe R(3) na pojavljuje (R(3) je samokonjugovana).

Pomenuti triplet kvarkova se zamišlja kao standardni bazis za 3 (bolje reći, na njih se i odnosi simbol 3), a triplet antikvarkova se uzima kao standardni bazis za 3^*. Direktno množenje $\otimes$ se pripisuje vezivanju fundamentalnih čestica u složeni sistem. Leva strana od (8.6.6) odgovara vezivanju po jednog kvarka sa po jednim antikvarkom, a desna strana kazuje da tako može da nastane jedan singlet složenog sistema (koji se tumači kao jedan manje poznati mezon) i jedan oktuplet (kaže se i oktet) takvih čestica. Tu se misli na oktuplet sa Crteža C 8.8.

Leva strana od (8.6.7) predstavlja vezivanje tri kvarka, a desna strana pokazuje da se tako može dobiti oktuplet (sa Crteža C 8.7) i dekuplet (multiplet od 10 članova) sa Crteža C 8.9 itd.

Da bi se ovaj kvark-model doslovno sproveo, bilo je nužno da se za kvarkove predskažu osobine date u Tabeli Tb 8.2. One su neobične.

Tabela 8.2: **Kvarkovi.** *Nakon simbola kvarka slede: električni naboj (Q, u jedinicama naelektrisanja elektrona), spin (s) sa ukupnom parnošću (Π), izospin (t), treća komponenta izospina (t_3), stranost (S), barionski broj (B), i hipernaboj (Y).*

Kvark	Q	s^Π	t	t_3	S	B	Y
q_1	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{2}^+$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$
q_2	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}^+$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$
q_3	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}^+$	0	0	-1	$\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$

Zadatak 8.6.6 Proučiti na nekoliko primera hadrona kako kvantni brojevi kvarkova (iz Tabele Tb 8.2) daju kvantne brojeve hadrona (iz Tabele Tb 8.1).

I posle dugo godina upornog eksperimentalnog "lova na kvarkove", oni nisu pronađeni. Moguće je da oni imaju tako veliku masu u slobodnom stanju, tj. da im je tako veliki tzv. maseni defekt, a to znači smanjenje mase prilokom vezivanja, da naši akceleratori još nisu dovoljno jaki da ih proizvedemo (u koliziji dovoljno ubrzanih čestica). Ali moguće je i to da je kvark model jedan ćorsokak. Progres nauke se odvija putem *trial and error*[8.6.10]; u slobodnom prevodu: učini pokušaj pa ispravi što si pogrešio. Možda će nam već bliska budućnost doneti potrebne ispravke na trnovitom putu prodiranja u strukturu hadrona.

[8.6.10] Engleski: pokušaj i greška; čitati: trajl end eror.

Glava 9

PROSTI SISTEMI I IDENTIČNE ČESTICE

9.1 Vodoniku sličan atom

Vodoniku sličan atom ima samo jedan elektron (a Z protona u jezgru, znači to je $Z-1$ puta pozitivno jonizovan atom). U ovom odeljku rešavamo svojstveni problem hamiltonijana ovog elektrona metodom separacije varijabli. Efektivni radijalni svojstveni problem ćemo svesti na jednu poznatu diferencijalnu jednačinu i naći ćemo diskretne svojstvene vektore u vidu poznatih specijalnih funkcija. Proučićemo diskretni spektar; degeneraciju pojedinih nivoa, koja potiče od rotacione i dodatne simetrije; kao i cepanje nivoa (tzv. finu strukturu) usled spina i relativističkih efekata.

9.1.1 Hamiltonijan elektrona

U ovom odeljku ćemo rešiti diskretni svojstveni problem hamiltonijana jednog elektrona (bez spina) u Coulomb-ovom polju jezgra u tzv. *vodoniku sličnom atomu*:

$$\hat{H} = \hat{T} - \frac{Ze^2}{r}, \tag{9.1.1}$$

gde je $\hat{T}$ operator kinetičke energije elektrona, Z naboj jezgra, a r rastojanje između (tačkastog) jezgra i (tačkastog) elektrona (prostor stanja je $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$).

U opisanoj definiciji problema imamo spoljašnje polje $-\frac{Ze^2}{r}$ od "beskonačno teškog" jezgra i masu elektrona m_e u izrazu za kinetičku energiju $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta$. Ova aproksimacija "beskonačno teškog" spoljašnjeg izvora polja (koja zanemaruje povratni uticaj kretanja elektrona na jezgro) nije loša, jer je masa protona (a tim pre masa jezgra) $3-4$ reda veličine veća od mase elektrona. Ali u stvari nam ova aproksimacija nije potrebna, jer možemo rešavati problem egzaktno.

Kao što smo naučili u kvantnom problemu dve čestice u § 4.5, treba preći na centar mase i relativnu česticu, zaboraviti centar mase i rešavati jodnočestični problem relativne čestice. Praktično, razlika će se ispoljiti samo u masi efektivne čestice: u $\hat{T}$ ćemo m_e zameniti sa $m = m_{\text{RČ}} = \frac{m_e m_j}{m_e+m_j} = \frac{m_e}{1+\frac{m_e}{m_j}}$, gde je m_j masa jezgra (uporediti (4.5.6b)). Kao što smo rekli, usled $m_j \gg m_e$, ispravka $\frac{m_e}{m_j}$ je zaista mala.

Izvođenjem diskretnih svojstvenih vrednosti i svojstvenih vektora hamiltonijana (9.1.1) dobićemo energetske nivoe i odgovarajuća tzv. *vezana stanja*[9.1.1] (elektronskog omotača) vodonikovog atoma (tj. atoma sa $Z=1$), (omotača) jedanput jonizovanog helijumovog atoma He^+ $(Z=2)$, dvaput jonizovanog litijumovog atoma Li^{++} $(Z=3)$ itd.

9.1.2 Efektivni radijalni svojstveni problem

Pošto Coulomb-ova potencijalna energija zavisi samo od r, pogodno je uvesti sferne polarne koordinate, tj. izvršiti faktorizaciju prostora stanja $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}) = \mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\Omega)$. Operator kinetičke energije $\hat{T}$ smo već imali na jeziku ovih koordinata u (6.6.17). Zamenom u (9.1.1) dobićemo

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}. \tag{9.1.2}$$

Očigledno (9.1.2) zadovoljava uslov za primenu metoda separacije varijabli (§ 6.5.6). Prvo ćemo u $\mathcal{L}^2(\Omega)$ rešiti zajednički svojstveni problem za $\hat{\mathbf{l}}^2$ i $\hat{l}_z$, što, kao što znamo, rezultuje sfernim harmonicima $Y_l^m(\theta,\varphi)$, a zatim ćemo za svaku vrednost l rešavati u $\mathcal{L}^2(r)$ efektivni (radijalni) svojstveni problem

$$\hat{H}_{ef} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}. \tag{9.1.3}$$

Rešenja od (9.1.3) pisaćemo kao $R_{El}(r)$. Svojstveni vektor u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ će onda imati vid

$$R_{El}(r)Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{9.1.4}$$

i odgovaraće svojstvenoj vrednosti E, kao što sledi iz metoda separacije varijabli.

9.1.3 Laplace-ova jednakost

U ovom paragrafu ćemo poći od svojstvenog problema operatora $\hat{H}_{ef}$, datog sa (9.1.3). U sređenijem vidu ova svojstvena jednakost (sa E kao svojstvenom vrednošću) glasi:

$$[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(\frac{Ze^2}{r} + E)]R_{El}(r) = 0. \tag{9.1.5}$$

Diferencijalnu jednačinu drugog reda (9.1.5) ćemo transformisati u jednu drugu, koja je standardna, tj. dobro poznata u teoriji specijalnih funkcija.

Uvedimo smenu konstanti

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \ \Leftrightarrow\ E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \tag{9.1.6a,b}$$

[9.1.1] Diskretne energetske vrednosti su po pravilu izolovane tačke spektra, što jasno ukazuje na diskretne skokove u mogućoj strukturi omotača i stoga na vezana stanja. Ispostaviće se da su sve diskretne svojstvene vrednosti od $\hat{H}$ negativne, kao što i očekujemo kvalitativno. Naime, $\hat{T}$ ima čisto kontinualan spektar (§ 6.6.5), te diskretno rešenje od $\hat{H}$ može da potiče samo od "prevage" negativne potencijalne energije, a to je vezivanje.

(pišemo κ zbog analogije sa talasnim brojem $k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ u slučaju slobodne čestice; anticipiramo negativnu vrednost za E, tj. umesto $-E$ mogli smo pisati $|E|$). Osim toga, izvršimo *smenu nezavisno promenljive* $r \to x$:

$$x \stackrel{\text{def}}{=} 2\kappa r \quad \Leftrightarrow \quad r(x) = \frac{x}{2\kappa} \tag{9.1.7a,b}$$

i obeležićemo $R_{El}(r(x)) = Q(x)$. Onda (9.1.5) postaje

$$[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{n}{x} - \frac{1}{4}]Q(x) = 0, \tag{9.1.8}$$

a to smo dobili deljenjem sa $4\kappa^2$ nakon smene (9.1.6b) i (9.1.7b) i uvođenjem konstante

$$n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{mZe^2}{\hbar^2\kappa} = \frac{Ze^2}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{-2E}}. \tag{9.1.9}$$

Treba zapaziti da konstanta n (zasad realan broj) sad preuzima ulogu svojstvene vrednosti E, tj. (9.1.8) zavisi od l i od n kao od parametara.

Ispitajmo sad kako se rešenje $Q(x)$ *ponaša u koordinatnom početku*. Kao što je uobičajeno u teoriji diferencijalnih jednačina, pretpostavićemo da se $Q(x)$ može pisati u vidu stepenog reda. Oko nule ovakav red se ponaša kao sabirak najnižeg stepena x^s (s nepoznato).

Da bismo izračunali s, zanemarimo u (9.1.8) sabirke $\frac{n}{x}$ i $-\frac{1}{4}$ u odnosu na $\frac{l(l+1)}{x^2}$, koji dominira, i stavimo $Q(x) \approx x^s$: $s(s-1)x^{s-2} + \frac{2}{x}sx^{s-1} - \frac{l(l+1)}{x^2}x^s = 0$. Deleći sa x^{s-2} (nismo u samoj nuli, samo blizu nje, stoga to smemo učiniti), dolazimo do $s(s+1) = l(l+1)$. Ovo daje dva rešenja: $s = -(l+1)$ i $s = l$. Prvo ćemo odbaciti, jer bi se funkcija $Q(x)$ ponašala u nuli kao x^{-l-1}, tj. imala bi singularitet i ispala bi iz domena od $\hat{H}_{ef}$, jer za pripadanje domenu je potrebna konačnost i diferencijabilnost u $0 < x < \infty$. Znači, $s = l$ tj.

$$Q(x) \sim x^l, \quad x \to 0 \tag{9.1.10}$$

($\sim$ znači "ponaša se kao")

Kao sledeće, ispitajmo ponašanje funkcije $Q(x)$ u beskonačnosti, tzv. *asimptotsko ponašanje*. Sad u (9.1.8) možemo zanemariti sve članove osim prvog i poslednjeg, koji očigledno dominaraju; tako da se u (9.1.8) svodi na $(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{1}{4})Q(x) = 0$. Lako se vidi da rešenja glase $Q(x) = e^{\pm\frac{x}{2}}$. Rešenje sa " + " moramo odbaciti jer odgovarajuće $Q(x)$ nije integrabilno, tj. ne daje $R_{El}(r) \in \mathcal{L}^2(r)$ (a mi rešavamo diskretni svojstveni problem). Dakle,

$$Q(x) \sim e^{-\frac{x}{2}}, \quad x \to \infty. \tag{9.1.11}$$

Pokazuje se celishodnim izdvojiti ponašanje u nuli i u beskonačnosti kao faktore, tj. izvršiti dalju transformaciju naše jednačine (9.1.8) *smenjujući* $Q(x)$ sa $S(x)$:

$$Q(x) = x^l e^{-\frac{x}{2}} S(x) \tag{9.1.12}$$

Nakon potrebnih diferenciranja i smenjivanja, (9.1.8) prelazi u

$$\boxed{[x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + (2l + 2 - x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + (n - l - 1)]S(x) = 0}. \tag{9.1.13}$$

Stigli smo, najzad, do tražene standardne diferencijalne jednačine. Naime, tzv. *Laplace-ova jednakost* u opštem slučaju glasi

$$[x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + (\beta - x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \alpha]f(x) = 0, \tag{9.1.14}$$

gde su α i β proizvoljni kompleksni brojevi. U našem slučaju

$$\beta = 2l + 2, \quad \alpha = l + 1 - n. \tag{9.1.15a,b}$$

9.1.4 Konfluentni hipergeometrijski red

Ako odbacimo rešenja Laplace-ove jednačine koja imaju singularitet u koordinatnom početku (i stoga su van domena od $\hat{H}_{ef}$), preostaje samo tzv. *konfluentni hipergeometrijski red* (koji je konačan u $x = 0$):

$$F(\alpha \mid \beta \mid x) \overset{\text{def}}{=} 1 + \frac{\alpha}{\beta}\frac{x}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\frac{x^2}{2!} + \ldots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+k)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta+k)}\frac{x^k}{k!}. \tag{9.1.16}$$

U (9.1.16) se pojavljuju tzv. *gama funkcije* $\Gamma(t)$. One imaju sledeću važnu osobinu:

$$\Gamma(t) = (t-1)\Gamma(t-1), \tag{9.1.17}$$

u analogiji sa faktorijelom, tako da su $\Gamma(t)$ neka vrsta uopštenja faktorijela na proizvoljne kompleksne brojeve (pri tome $\Gamma(t)$ odgovara $(t-1)!$ za pozitivnu i celu vrednost od t).

Usled (9.1.15) za nas su od interesa funkcije $F(l + 1 - n \mid 2l + 2 \mid x)$ kao jedini kandidati za rešenja $S(x)$. Postavlja se pitanje da li svaka funkcija F može biti rešenje S.

9.1.5 Asocirani Laguerre-ovi polinomi

Po pravilu funkcije F divergiraju kao e^x, tako da i nakon supstitucije $S(x) = F(x)$ u (9.1.12) imamo divergenciju $Q(x) \sim e^{\frac{x}{2}}, \;\; x \to \infty$ i nećemo dobiti rezultat $R_{El}(r) \in \mathcal{L}^2(r)$.

Međutim, za izuzetne vrednosti od α (zapravo $l+1-n$ u našem slučaju) u beskonačnom redu F svi koeficijenti postaju nula počev od izvesnog stepena i tako se F svodi na polinom. Kada je $S(x)$ polinom, onda $Q(x) = x^l e^{-\frac{x}{2}} S(x)$ ne divergira u beskonačnosti i dobijamo $R_{El}(r) \in \mathcal{L}^2(r)$.

Konfluentni hipergeometrijski red F se svodi na polinom u tom i samo u tom slučaju kada je $\alpha \overset{\text{def}}{=} l + 1 - n$ negativan ceo broj ili nula, tj. kada je

$$l + 1 - n = -n', \quad n' \doteq 0, 1, 2, 3 \ldots \tag{9.1.18}$$

A kada se svodi, polinom koji se dobije je reda n', naziva se *asocirani Laguerre-ov* (čitati Lagerov) *polinom* i obeležava sa $L_{n'}^{2l+1}(x)$.

U opštem slučaju, Laguerre-ovi polinomi $L_p^k(x)$ glase:

$$L_p^k(x) = \frac{[(p+k)!]^2}{p!k!} F(-p|k+1|x) = \sum_{s=0}^{p} (-1)^s \frac{[(p+k)!]^2}{(p-s)!(k+s)!s!} x^s, \tag{9.1.19}$$

gde su p i k nenegativni celi brojevi. U našem slučaju, $p = n'$, $k = 2l + 1$ i

$$L_{n'}^{2l+1}(x) = \frac{[(n' + 2l + 1)!]^2}{n'!(2l + 1)!} F(l + 1 - n'|2l + 2|x) \tag{9.1.20}$$

uz važenje (9.1.18).

Dakle, imamo rešenje Laplace-ove jednačine (9.1.13) u vidu $S(x) = L_{n'}^{2l+1}(x)$. A ako se vratimo na polazne radijalne funkcije $R_{El}(r)$, imamo[9.1.2]

$$R_{El}(r) = \text{const}(2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa r). \tag{9.1.21}$$

9.1.6 Energetski nivoi

Vratimo se uslovu (9.1.18):

$$\boxed{n = l + 1 + n', \ n' = 0, 1, 2, \dots} \tag{9.1.22}$$

Kvantni broj n' se naziva *radijalnim kvantnim brojem.* Pošto je n' red Laguerre-ovog polinoma, to je istovremeno i broj nula (tzv. čvorova) radijalne funkcije $R_{EL}(r)$. Kvantni broj n, koji može da bude $l + 1, l + 2$, itd., naziva se *glavnim kvantnim brojem.* Njegova uloga u prebrojavanju energetskih nivoa postaje jasna kada (9.1.9) rešimo po E (i pišemo E_n umesto E.):

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{n^2}\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}, \ n = 1, 2, ...} \tag{9.1.23a,b}$$

Najniži energetski nivo (osnovni nivo) je $E_1 = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}$, a ostalih prebrojivo beskonačno mnogo nivoa se približava nuli sa $n \to \infty$ i ima tačku nagomilavanja u nuli.

Može da se pokaže da svaki potencijal $V(r)$ koji asimptotski teži nuli sporije nego $\frac{1}{r^2}$, a sa negativne strane (tzv. dalekodometni potencijal; $V(r) = -Z\frac{e^2}{r}$ je specijalni slučaj) daje sličan diskretni spektar: prebrojivo beskonačno mnogo negativnih nivoa koji teže nuli kao limesu. A ako je potencijal $V(r)$ negativan i teži nuli za $r \to \infty$ kao $\frac{1}{r^2}$ ili brže (tu spada i tzv. pravougaona jama: $V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < r_0, \\ 0, & r > r_0 \end{cases}$) — to je tzv. bliskodometni potencijal — onda je broj diskretnih energetskih nivoa konačan (ili čak nula), ali opet su negativni.

9.1.7 Potpuna klasifikacija stanja i degeneracija energetskih nivoa diskretnog spektra

Kao što smo videli u (9.1.23a), glavni kvantni broj n prebrojava energetske nivoe vezanog elektrona u vodoniku sličnom atomu. Stoga je i u radijalnim funkcijama $R_{El}(r)$ u (9.1.21) pogodnije zameniti E sa n (čime se, u stvari, menja i funkcionalna zavisnost $R(r)$).

Kad se podsetimo kako glasi krajnji rezultat za svojstveni vektor od $\hat{H}$ koji smo dobili metodom separacije varijabli (6.5.28), onda iz (9.1.21) dobijamo

$$\boxed{R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \varphi) = A(2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa r)Y_l^m(\theta, \varphi)}, \tag{9.1.24a}$$

[9.1.2]Pošto smo (ispod (9.1.7)) imali $Q(x) \stackrel{\text{def}}{=} R(r(x)) = R(x/2\kappa)$, obratno, iz Q ćemo dobiti R pomoću složene funicionalne zavisnosti: $R(r) = Q(x(r)) = Q(2\kappa r)$, jer $Q(x(r(x))) = Q(x)$, tj. $x(r)$ i $r(x)$ su uzajamno inverzne funkcionalne zavisnosti.

gde je

$$\kappa = \frac{1}{n}\frac{mZe^2}{\hbar^2}, \tag{9.1.24b}$$

kao što sledi iz (9.1.6) i (9.1.23a), a A je konstanta normalizacije. Naravno, iako energetski nivoi ne zavise od magnetog kvantnog broja m, svojstveni vektori zavise od njega.

Potpuna klasifikacija stanja diskretnog spektra hamiltonijana elektrona u $\mathcal{H}_o$ glasi

$$\boxed{\{|\, nlm\,\rangle \mid m = -l, ...l;\ l = 0, 1, 2, ..., n-1;\ n = 1, 2, ...\}}, \tag{9.1.24c}$$

gde su $\langle\, r\theta\varphi \mid nlm\rangle \in \mathcal{L}^2(r, \theta, \varphi)$ u stvari funkcije date sa (9.1.24a). Važno je uočiti da za dato n, broj l može biti $l = 0, 1, 2, ..., n-1$ (kao što sledi iz (9.1.22)).

Uvedimo jednu relevantnu konstantu, tzv. *Bohr-ov* radijus:

$$a_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 10^{-8}\text{cm} \tag{9.1.25}$$

(pod m podrazumevamo redukovanu masu elektrona i jezgra vodoniku sličnog atoma, mada se često umesto toga stavlja m_e, masa elektrona).

Prvih nekoliko (normiranih) radijalnih funkcija ima vid:

$$R_{1,0}(r) = 2(\frac{Z}{a_0})^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}, \tag{9.1.26}$$

$$R_{2,0}(r) = 2(\frac{Z}{2a_0})^{\frac{3}{2}}(1 - \frac{Zr}{2a_0})e^{-\frac{Zr}{2a_0}}, \quad R_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}(\frac{Z}{2a_0})^{\frac{3}{2}}\frac{Zr}{a_0}e^{-\frac{Zr}{2a_0}}, \tag{9.1.27}$$

$$R_{3,0}(r) = 2(\frac{Z}{3a_0})^{\frac{3}{2}}(1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2Z^2r^2}{27a_0^2})e^{-\frac{Zr}{3a_0}}, \quad R_{3,1}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3}(\frac{Z}{3a_0})^{\frac{3}{2}}(1 - \frac{Zr}{6a_0})e^{-\frac{Zr}{3a_0}}, \tag{9.1.28}$$

$$R_{3,2}(r) = \frac{2}{27}\sqrt{\frac{2}{5}}(\frac{Z}{3a_0})^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

Zadatak 9.1.1 Na osnovu (9.1.26)-(9.1.28) pokazati da se $R_{nl}(r)$ za male r ponaša kao r^l što povlači da je za veće l sve veći interval oko nule u kome je $R_{nl}(r)$ malo (tj. kao da je elektron sve dalje od jezgra). To se objašnjava tzv. *centrifugalnom barijerom* (to je član $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ u (9.1.3)), koja se ispoljava u odbojnom delovanju na elektron.

Zadatak 9.1.2 Definišimo

$$\rho(r) \stackrel{\text{def}}{=} r^2 R_{nl}^2(r), \tag{9.1.29}$$

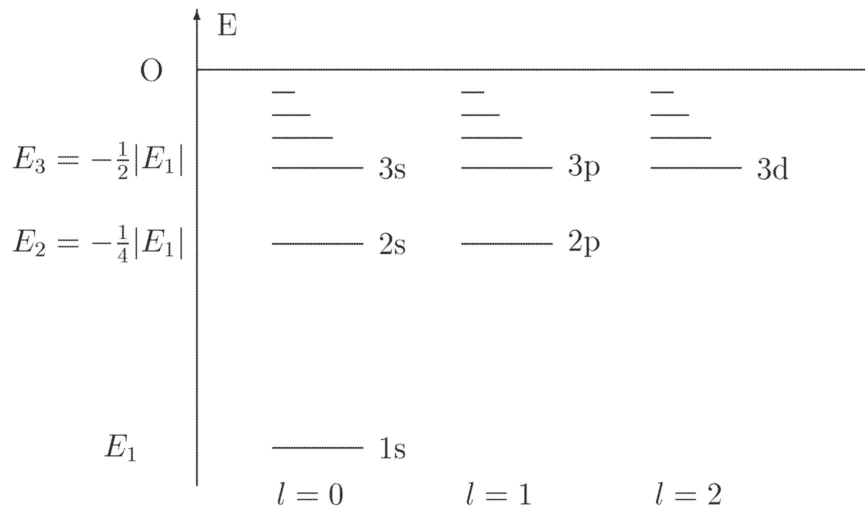
(r^2 potiče iz integrisanja $\int_0^\infty ...r^2\, dr$ u $\mathcal{L}^2(r)$, mi ga formalno uračunavamo u radijalnu gustinu verovatnoće). U primerima (9.1.26)-(9.1.28) za maksimalno l pokazati da formula za najverovatniji položaj r_0 glasi

$$r_0 = \frac{n^2 a_0}{Z}, \tag{9.1.30}$$

a to je upravo vrednost iz Bohr-Sommerfeld-ovog modela za kružnu orbitu (eliptičnim orbitama u tom modelu odgovaraju nemaksimalne vrednosti za l).

Zadatak 9.1.3 Na osnovu primera (9.1.26)-(9.1.28) pokazati da važe formule

$$\langle\, r\,\rangle = \frac{a_0}{2Z}[3n^2 - l(l+1)], \quad \langle\, r^2\,\rangle = \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]. \tag{9.1.31a,b}$$



Slika 9.1: **Delimična klasifikacija stanja (sa kvantnim brojevima n i l (bez m).** *Kao što je uobičajeno) na kvalitativnom prikazu su nivoi razmaknuti horizontalno samo da bi kvantni broj l došao do izražaja.*

Zadatak 9.1.4 Za $n = 3$, $l = 0, 1, 2$ izračunati neodređenost Δr u distribuciji verovatnoće nalaženja po r. Proučiti i komentarisati kako se efekat centrifugalne barijere ispoljava na $\langle\, r\, \rangle$ i Δr.

Zadatak 9.1.5 Pokazati da energetski nivo E_n ima multiplicitet (degeneraciju):

$$\boxed{\dim \mathcal{V}(E_n) = n^2}, \tag{9.1.32}$$

gde smo sa $\mathcal{V}(E_n) \subset \mathcal{H}_o$ obeležili svojstveni potprostor hamiltonijana koji odgovara svojstvenoj vrednosti E_n. Obratiti pažnju na to da u (9.1.32) spin nije uračunat.

9.1.8 Kontinualni spektar i nevezana stanja elektrona

Može se pokazati da za svaku nenegativnu vrednost energije E svojstveni problem hamiltonijana elektrona u vodoniku sličnom atomu ima (uopšteno) rešenje[9.1.3]. Kontinualni spektar je, prema tome, $[0, \infty)$ i svaka kontinualna svojstvena vrednost E je $\aleph_0$ puta degenerisana (jer za dato E elektron može imati bilo koju moguću vrednost za l i za m).

Pošto pomenuti uopšteni svojstveni vektori opisuju *nevezana stanja* elektrona (ali ne "slobodna" stanja, to bi značilo da nema spoljašnjeg polja), oni nisu toliko važni u kontekstu proučavanja strukture vodoniku sličnog atoma, koliko u kontekstu *rasejanja elektrona u Coulomb-ovom polju.*

Na ovom mestu možemo da ukažemo na činjenicu da se svojstveni problem hamiltonijana vodoniku sličnog atoma može rešavati u paraboličnim koordinatama[9.1.4].

[9.1.3] Detaljnije o kontinualnom spektru vodoniku sličnog atoma videti na primer u Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика, нерелятивистская теория*, издание третье, Наука, Москва, 1974, str. 151-154.

[9.1.4] Nalaženje kontinualnih svojstvenih vektora u paraboličim koordinatama može se naći u: E. Mersbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley, New York, 1970; str. 245-250.

9.1.9 * Dodatna simetrija Coulomb-ovog potencijala

Vratimo se diskretnim energetskim nivoima E_n i odgovarajućim svojstvenim potprostorima $\mathcal{V}(E_n)$. Kada se ovi dekomponuju u višestruke ireducibilne potprostore ("ormare") za $\hat{\mathbf{l}}$ (uporediti drugu polovinu od § 8.3.10), dobiju se isključivo jednostruki ireducibilni potprostori, ali više njih ($l = 0, 1, ..., n-1$) unutar $\mathcal{V}(E_n)$. Kao što je bilo rečeno u § 8.3.10, ovde pored orbitne rotacione simetrije imamo i *dodatne simetrije* i to u vidu operatora simetrija (ili operatora koji ove generišu) i one ne komutiraju sa pomenutim rotacijama (niti sa $\hat{\mathbf{l}}$). Ponekad se dodatna simetrija naziva i "slučajnom" simetrijom (relativan pojam, misli se u odnosu na pomenutu rotacionu simetriju).

Ispostavlja se da je pomenuta dodatna simetrija generisana tzv. *Runge-Lenz-ovim vektorskim operatorom*

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\hbar}{2mZe^2}(\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{l}}) + \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r}, \tag{9.1.33}$$

koji komutira sa hamiltonijanom (9.1.2)

$$[\,\hat{\mathbf{A}}, \hat{H}\,] = 0, \tag{9.1.34}$$

i čije kompononte sa komponentama od $\hat{\mathbf{l}}$ zadovoljavaju komutacione relacije

$$[\,\hat{l}_q, \hat{l}_{q'}\,] = \imath\hbar \sum_{q''} \epsilon_{qq'q''} \hat{l}_{q''}, \; [\,\hat{l}_q, \hat{A}_{q'}\,] = \sum_{q''} \imath\hbar\epsilon_{qq'q''} \hat{A}_{q''}, \; [\,\hat{A}_q, \hat{A}_{q'}\,] = -\sum_{q''} \imath\hbar\epsilon_{qq'q''} \frac{2}{Z^2e^4m} \hat{H}\hat{l}_{q''}, \tag{9.1.35}$$

gde je $q, q' = x, y, z$.

Ispostavlja se da je ortogonalna grupa (ili, kako se još kaže, "rotaciona" grupa) u četiri dimenzije, O(4), ta šira grupa simetrije od $\hat{H}$ koja je generisana sa $\hat{\mathbf{l}}$ i $\hat{\mathbf{A}}$, i u odnosu na koju nema dodatne simetrije, tj. svaki svojstveni potprostor $\mathcal{V}(E_n)$ tačno je jedan ireducibilni invarijantni potprostor[9.1.5] za $O(4)$.

Završimo ovaj paragraf sa dve napomene.

Što se tiče grupno-teorijske analize simetrije hamiltonijana, na prvi pogled grupa O(4) daje sve što se poželeti može. Ipak, i od toga se otišlo dalje, nađena je jedna (dosta složena) nadgrupa od O(4), koja više nije grupa simetrije hamiltonijana, već tzv. *grupa koja generiše spektar* (engleski: *spectrum-generating group*,). Ona ima sledeću osobinu: jedna (specijalna) ireducibilna reprezentacija ove grupe sadrži sve $\mathcal{V}(E_n)$ po jedanput, tj. sadrži tačno ceo diskretni spektar od $\hat{H}$.

S druge strane, može da se pokaže da je prisustvo pomenute dodatne simetrije hamiltonijana usko povezano sa veoma značajnom fizičkom činjenicom da elektron ima *zatorenu putanju* (kao planeta oko sunca) umesto da putanja vrši precesiju, kao što je slučaj sa ventralnim potencijalima koji nisu Coulomb-ovog tipa.

9.1.10 Fina struktura

Poznato je da u spoljašnjem polju (pri tome ne mislimo na polje jezgra) nastaje cepanje degenerisanih nivoa elektrona u vodoniku sličnom atomu. U električnom polju imamo Stark-ov

[9.1.5] Detaljnije o ovome videti u L. Fonda, G.C. Ghirardi, *Symmetry Principles in Quantum Physics*, Marcel Dekker, Inc.,New. York, 1970, str. 222-228 ili u referenci iz 9.1.3, str. 154-156.

efekt, a u magnetnom polju Zeeman-ov efekt. Ali i kada vodoniku sličan atom nije u spoljašnjem polju, precizni eksperimenti (sa dobrom rezolucijom) otkivaju cepanje. To je tzv. *fina struktura* energetskih nivoa. Moramo se zapitati kako to teorija objašnjava.

Pre svega, nismo uopšte uzeli u obzir spin $s = \frac{1}{2}$ elektrona. Na prvi pogled jedina posledica spina je u udvostručavanju degeneracije (sa n^2 na $2n^2$). Međutim, to nije sve. Naime, suština spina je u tome što se elektron u EM polju ponaša kao magnetni dipol, jer ima unutrašnji magnetni dipolni moment. Krećući se oko jezgra elektron "preseca" silnice električnog polja (kako to klasično možemo da vizualizujemo) i stoga, preko svog magnetnog dipola, može da oseti efektivno magnetno polje.

Prelaskom sa relevantnih formula iz klasične teorije EM pojava na kvantnu mehaniku dobija se član u hamiltonijanu koji glasi

$$\hat{H}'_{sl} = \frac{1}{m^2c^2}\hat{\mathbf{s}}\cdot\hat{\mathbf{l}}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}, \tag{9.1.36}$$

gde je c brzina svetlosti, a $V(r)$ u stvari $-\frac{Ze^2}{r}$ (u dobroj aproksimaciji).

Sabirak (9.1.36) u hamiltonijanu elektrona u vodoniku sličnom atomu naziva se *spin-orbitnim sprezanjem*. Semiklasično možemo da zamislimo kao da su unutrašnji i orbitalni magnetni dipolni moment (prvi je proporcionalan sa $\hat{\mathbf{s}}$, a drugi sa $\hat{\mathbf{l}}$) uzajamno spregnuti, tj. kao da "interaguje", u prisustvu spoljašnjeg polja $V(r)$, koje potiče od jezgra.

Ispostavlja se da je od prilike istog reda veličine i *relativistička korekcija* u hamiltonijanu elektrona ($\sim 10^{-4}$ od energije vezivanja elektrona). Nju možemo najprostije uzeti u obzir tako što ćemo zameniti izraz za kinetičku energiju poboljšanom relativističkom aproksimacijom ($\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \to \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{8m^3c^2}$ klasično).

Dakle, fina struktura mora da potiče od $\hat{H}'_{sl}$ i od relativističke korekcije zajedno. Izraz (9.1.36) se u relativističkoj kvantnoj mehanici koriguje i to tako što mu se desna strana smanjuje za faktor 2. Stoga, tačni izraz za spin-orbitno sprezanje glasi:

$$\boxed{\hat{H}_{sl} = \frac{1}{2m^2c^2}\hat{\mathbf{s}}\cdot\hat{\mathbf{l}}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}}. \tag{9.1.37}$$

Zadatak 9.1.6 Pokazati da, uz uvodjenje ukupnog jedno-elektronskog uglovnog momenta $\hat{\mathbf{j}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$, važi

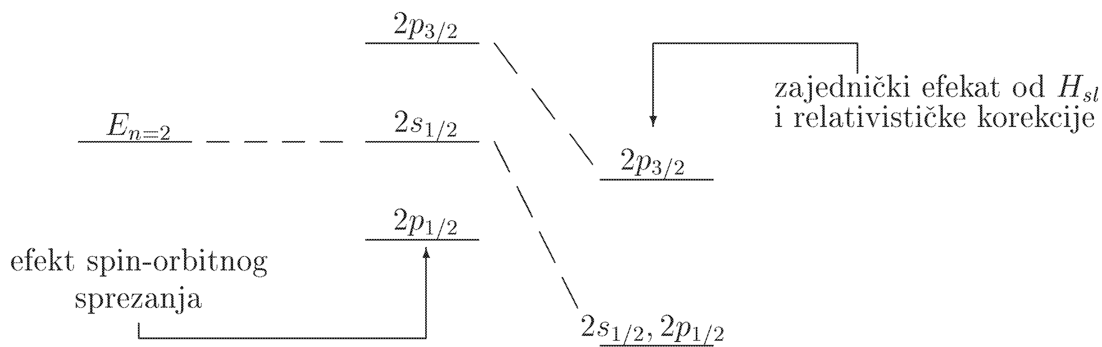
$$\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2). \tag{9.1.38}$$

Zadatak 9.1.7 Pokazati da potpunu klasifikaclju vezanih stanja elektrona za hamiltonijan (9.1.2) možemo izvršiti pomoću funkcija (spinskih sfernih harmonika)

$$R_{nl}(r)\langle\, \theta, \varphi, m_s \mid ljm_j \rangle \tag{9.1.39}$$

u $\mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\Omega) \otimes \mathbb{C}^2$ (uporediti (7.3.6)).

Zadatak 9.1.8 Pokazati da na osnovu (9.1.39) i (9.1.38) možemo rešiti svojstveni problem hamiltonijana u koji je član (9.1.37) uključen, i to tako da odmah dobijamo cepanje po vrednostima j (a preostaje degeneracija po m_j).



Slika 9.2: **Cepanje energetskog nivoa** $E_{n=2}$ *pri uračunavanju fine strukture.*

Da bismo ilustrovali finu strukturu, na Crtežu C 9.2 je prikazano cepanje energetskog nivoa $E_n = 2$. Zanimljivo je da se efekt od $\hat{H}_{sl}$ i relativistička korekcija tačno potiru za nivoe $2s_{\frac{1}{2}}$ i $2p_{\frac{1}{2}}$. To ostaje tako i u inače tačnijoj (Dirac-ovoj) relativističkoj kvantnoj teoriji elektrona. Eksperimentalno se opaža cepanje ta dva nivoa, što je tzv. Lamb-ov pomak (čitati Lem; engleski: *Lamb shift*). Ovo cepanje se teorijski može objasniti samo u kvantnoj elektrodinamici i to kao tzv. radijativna korekcija, koja potiče od interakcije elektrona sa sopstvenim poljem.

Na kraju paragrafa da ukažemo na postojanje tzv. *hiperfine strukture* energetskih nivoa vodoniku sličnog atoma. Ona se sastoji u još mnogo finijem cepanju nivoa, a poreklo efekta je u interakciji unutrašnjeg magnetnog dipola elektrona sa magnetnim dipolom jezgra (zbog relativno velike uzajamne udaljenosti elektrona i jezgra ovaj efekat je mali).

Zadatak 9.1.9 Proučiti ponovo § 3.4.6 i § 7.3.4 dopunjavajući šta je tamo samo anticipirano.

9.2 Harmonijski oscilator

Kvantizacijom hamiltonijana klasičnog trodimenzionalnog harmonijskog oscilatora dobija se hamiltonijan istoimenog kvantnomehaničkog sistema. U ovom odeljku rešićemo svojstveni problem hamiltonijana ovog sistema, koji je jedan od najprostijih u kvantnoj mehanici. Obratićemo pažnju i na različite mogućnosti rešavanja. Ponovo ćemo elaborirati šta znači "raspadanje" hamiltonijana trodimenzionalnog problema (na tri jednodimenzionalna). Videćemo da se zbog ovog raspadanja problem lakše rešava preko kinematičkih stepeni slobode koje definišu pravougle Descartes-ove koordinate nego preko kinematičkih stepeni slobode koji odgovaraju sfernim polarnim koordinatama.

9.2.1 Definicija problema

U klasičnoj mehanici hamiltonova funkcija trodimenzionalnog harmonijskog oscilatora glasi

$$\boxed{H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{r}^2}, \tag{9.2.1}$$

što je ekvivalentno delovanju sile $\mathbf{F} = -m\omega^2\mathbf{r}$, koja česticu privlači ka koordinatnom početku i deluje tim jače čim je čestica više udaljena od koordinatnog početka (a ω je tzv. uglovna frekvenca, pojavljuje se u vezi sa klasičnom trajektorijom).

Kvantizacijom (9.2.1) dobijamo hamiltonijan kvantnomehaničkog *harmonijskog oscilatora*

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{\mathbf{r}}^2. \tag{9.2.2}$$

koji je definisan u orbitnom prostoru stanja $\mathcal{H}_o$ jedne čestice. Da li čestica ima spin ili ne irelevantno je i $\mathcal{H}_s$ ne uzimamo u razmatranje ni ako je $s > 0$.

Ako uvodemo Descartes-ove koordinate x, y, z i izvršimo odgovarajuću faktorizaciju $\mathcal{H}_o = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$, onda u skladu s tim (9.2.2) možemo da prepišemo u vidu

$$\hat{H} = \sum_{q=x,y,z} [\frac{\hat{p}_q^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2]. \tag{9.2.3}$$

Pojedini sabirci deluju u odgovarajućim faktor-prostorima $\mathcal{H}_q$, $q = x, y, z$, i ova tri kinematička stepena slobode su *uzajamno dinamički nezavisna*, tj. imamo raspadanje trodimenzionalnog dinamičkog problema na tri jednodimenzionalna

$$\hat{H}_q = \frac{\hat{p}_q^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2. \tag{9.2.4}$$

Pre nego što se udubimo u to šta znači pomenuto raspadanje dinamičkog problema, zaustavimo se radi tri napomene.

i) Hamiltonijan tzv. *anizotropnog* oscilatora (koji nećemo proučavati) glasi

$$\hat{H} = \sum_{q=x,y,z} [\frac{\hat{p}_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2}{2}\hat{q}^2], \tag{9.2.5}$$

gde su bar dve od uglovnih frekvenci $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ različite (za razliku od *izotropnog* harmonijskog oscilatora, za koji je $\omega_x = \omega_y = \omega_z$.

ii) Po uzoru na (9.2.3) može se definisati N-dimenzionalni harmonijski oscilator, $N = 2, 3, 4, \ldots$. Onda $q = 1, 2, \ldots, N$, $\mathcal{H} = \otimes_{q=1}^N \mathcal{H}_q$, a $\hat{H} = \sum_{q=1}^N \hat{H}_q$.

iii) Videćemo niže (u § 9.2.5) da se (9.2.2) može rešiti i u sfernim polarnim koordinatama separacijom varijabli.

9.2.2 Dinamički nezavisni kinematički stepeni slobode

Po uzoru na (9.2.3), pretpostavimo da je kvantni sistem složen i da se može razložiti na, recimo, N stepeni slobode (ili materijalnih podsistema):

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N. \tag{9.2.6}$$

Osim toga, pretpostavimo da se hamiltonijan sistema sastoji od N članova

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i, \tag{9.2.7}$$

tako da pojedini članovi $\hat{H}_i$ deluju u pojedinim faktor-prostorima $\mathcal{H}_i$, $i = 1, 2, ...N$. To je slučaj *dinamičke nezavisnosti* dotičnih N stepeni slobode. Nasuprot tome, dinamička zavisnost bi značila da u $\hat{H}$ postoji bar jedan član koji deluje u bar dva faktor-prostora netrivijalno, tj. koji dinamički spreže, čini uzajamno zavisnim, dva stepena slobode.

Podsetićemo se sad da dinamička nezavisnost ima za posledicu *raspadanje* svojstvenog problema od $\hat{H}$ datog sa (9.2.7), kao što sledi iz teorije direktnih proizvoda Hilbert-ovih prostora

Stav 9.2.1 *Ako su $\hat{H}_i \mid n_i \rangle = E_{n_i} \mid n_i \rangle$, $i = 1, 2, ...N$ diskretna rešenja svojstvenih problema pojedinih članova $\hat{H}_i$ iz (9.2.7) u pojedinim faktor-prostorima $\mathcal{H}_i$, onda*

$$\hat{H}(\mid n_1 \rangle \otimes \cdots \otimes \mid n_N \rangle) = (E_1 + E_2 + ... + E_N)(\mid n_1 \rangle \otimes \cdots \otimes \mid n_N \rangle), \tag{9.2.8}$$

tj. diskretno rešenje kompozitnog svojstvenog problema dobijamo direktnim množenjem svojstvenih vektora i sabiranjem odgovarajućih svojstvenih vrednosti.

Stav 9.2.2 *Ako su $\{\mid n_i \rangle \mid n_i = 1, 2, ...\}$, $i = 1, 2, ...N$ diskretni svojstveni bazisi od $\hat{H}_i$ u $\mathcal{H}_i$, onda je $\{\mid n_1 \rangle \otimes \cdots \otimes \mid n_N \rangle | n_1, \ldots, n_N = 1, 2, ...\}$ diskretni svojstveni bazis od $\hat{H}$ u $\mathcal{H}$.*

Po potrebi čitalac će lako da proširi ove Stavove na slučaj degenerisanih nivoa u faktor-prostorima, kao i na slučaj kontinualnih svojstvenih rešenja. Obratiti pažnju na činjenicu da u mešovitom slučaju, tj. kada direktno množimo diskretni svojstveni vektor kontinualnim, uvek dobijamo kontinualni svojstveni vektor kompozitnog hamiltonijana (zašto?).

Sadržaj ovog paragrafa je veoma blizak sadržaju § 6.5.4, a skoro se podudara sa sadržajem (3.4.16a)-(3.4.17c).

9.2.3 Rešavanje Schrödinger-ove jednačine linijskog oscilatora

Iz rezultata prethodnog paragrafa je očigledno da treba rešiti svojstveni problem operatora

$$\hat{H}_x = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{9.2.9}$$

u $\mathcal{H}_x$. Operatori $\hat{H}_y$ i $\hat{H}_z$ su ekvivalentni sa $\hat{H}_x$, tj. iste su operatorske funkcije osnovnog skupa opservabli kao i $\hat{H}_x$. Stoga ćemo rešenja za $\hat{H}_x$ lako preneti u $\mathcal{H}_y$ i $\mathcal{H}_z$.

Jednakost (9.2.9) definiše hamiltonijan tzv. *linijskog oscilatora* (na x-osi).

Prepišimo svojstveni problem od (9.2.9) u $\mathcal{L}^2(x)$ i izvršimo zamenu nezavisno promenljive:

$$s \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x. \tag{9.2.10}$$

Tako dolazimo do

$$(\frac{d^2}{ds^2}-s^2+\frac{2E}{\omega\hbar})\phi(s)=0, \tag{9.2.11}$$

gde je

$$\phi(s)\stackrel{\rm def}{=}\psi(x(s)), \tag{9.2.12}$$

a $\psi(x)$ je traženo rešenje prvobitnog svojstvenog problema $\hat{H}_x\psi(x)=E\psi(x)$.

U asimptotskom regionu, tj. za $s\to\pm\infty$, izraz (9.2.11) se svodi na $\frac{\mathrm{d}^2\phi(s)}{\mathrm{d}s^2}=s^2\phi(s)$, što daje asimptotsko rešenje (tj. rešenje u kome zadržavamo opet samo članove koji najbrže rastu) vida $e^{\pm\frac{s^2}{2}}$. Da bismo dobili svojstveni vektor konačne norme, moramo odbaciti rešenje sa predznakom +.

U sledećem koraku vršimo zamenu nepoznate funkcije:

$$\phi(s)=e^{-\frac{s^2}{2}}\chi(s). \tag{9.2.13}$$

Na osnovu (9.2.13) jednačina (9.2.11) se svodi na

$$(\frac{d^2}{ds^2}-2s\frac{d}{ds}+2n_x)\chi(s)=0, \tag{9.2.14}$$

gde smo definisali

$$2n_x\stackrel{\rm def}{=}\frac{2E}{\hbar\omega}-1 \tag{9.2.15}$$

(n_x je za sada nepoznata realna konstanta, biunivoko povezana sa E).

Jednakost (9.2.14) je standardna diferencijalna jednačina, dobro poznata u teoriji specijalnih funkcija; daje rešenje konačne norme ako i samo ako je n_x *nenegativan ceo broj*. Odgovarajuća rešenja

$$\chi(s)=\mathrm{const}H_{n_x}(s),\quad n_x=0,1,2,... \tag{9.2.16}$$

su tzv. Hermite-ovi (čitati: hermitovi) polinomi (n_x-tog reda)

$$H_{n_x}(s)\stackrel{\rm def}{=}(-1)^{n_x}e^{s^2}\frac{d^{n_x}}{ds^{n_x}}e^{-s^2},\ n_x=0,1,2,... \tag{9.2.17}$$

Prvih nekoliko *Hermite-ovih polinoma* glasi:

$$H_0(s)=1,\ H_1(s)=2s,\ H_2(s)=-2+4s^2,\ H_3(s)=-12s+8s^3, \tag{9.2.18}$$

$$H_4(s)=12-48s^2+16s^4,\ H_5(s)=120s-160s^3+32s^5.$$

Kada se vratimo na $\psi(x)=\phi(s(x))$ dobijamo *diskretne svojstvene vektore* od $\hat{H}_x$ u $\mathcal{L}^2(x)$:

$$\boxed{\psi_{n_x}(x)=\frac{\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}}{\sqrt{2^{n_x}n_x!}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_{n_x}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)}. \tag{9.2.19}$$

Odgovarajući *diskretni energetski nivoi* slede iz (9.2.15) kada je rešimo po E:

$$\boxed{E_{n_x}=(n_x+\frac{1}{2})\hbar\omega}. \tag{9.2.20}$$

Ispostavlja se da funkcije $\psi_{n_x}(x)$ iz (9.2.19) čine kompletan ortonormirani bazis u $\mathcal{L}^2(x)$; dakle, $\hat{H}_x$ ima *čisto diskretan i prost spektar*.

Zadatak 9.2.1 Proveriti sve ispuštene međukorake.

Zadatak 9.2.2 Rešiti svojstveni problem od $\hat{H}_x$ (datog sa (9.2.9)) u impulsnoj reprezentaciji. (Indikacija: Iskoristiti rezultate ovog paragrafa na osnovu skoro simetrične zavisnosti $\hat{H}_x$ od $\hat{p}_x$ i od $\hat{x}$.)

Zadatak 9.2.3 U osnovnom stanju linijskog oscilatora izračunati $\langle\, \hat{x}\, \rangle$, $\langle\, \hat{p}_x\, \rangle$, $\Delta\hat{x}$, $\Delta\hat{p}_x$ i pokazati da je to stanje minimalni talasni paket.

Svojstvene vrednosti hamiltonijana linijskog oscilatora mogu se dobiti ne samo izloženim metodom, nego na još dva načina. Jedan je *Heisenberg-ov matrični metod* (istorijski najstarije rešenje), koji polazi od zakona kretanja u Heisenberg-ovoj slici i rešava problem spektra hamiltonijana u energetskoj reprezentaciji. Drugi je *Dirac-ov metod druge kvantizacije*[9.2.1] u kom se $\hbar\omega$ tretira kao kvant ekscitacije koji se na bozonski način kreira iz osnovnog stanja kao vakuuma. Proučićemo ovaj prilaz u glavi 9.2.11.

9.2.4 Rešenja za trodimenzionalni harmonijski oscilator

Iz svega prethodnog sledi da hamiltonijan $\hat{H}$ dat sa (9.2.3) ima čisto diskretan spektar, koji glasi:

$$\boxed{E_n = (n + \tfrac{3}{2})\hbar\omega} \qquad n = 0, 1, 2, ... n \stackrel{\text{def}}{=} n_x + n_y + n_z. \tag{9.2.21a,b}$$

Zadatak 9.2.4 Pokazati da je *multiplicitet* n-tog nivoa:

$$\dim \mathcal{V}(E_n) = \frac{1}{2}(n+1)(n+2). \tag{9.2.22}$$

Svojstvene funkcije hamiltonijana (9.2.3) u x, y, z-reprezentaciji glase

$$\boxed{\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \left(\tfrac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \tfrac{1}{\sqrt{2^n n_x! n_y! n_z!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2} H_{n_x}(x\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}}) H_{n_y}(y\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}}) H_{n_z}(z\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}})}. \tag{9.2.23}$$

9.2.5 Metod separacije sfernih polarnih koordinata

U sfernim polarnim koordinatama hamiltonijan (9.2.3) glasi

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2mr^2} + \frac{m\omega^2}{2}r^2 \tag{9.2.24}$$

(u $\mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\Omega)$). U punoj analogiji sa hamiltonijanom vodoniku sličnog atoma, možemo primeniti metod separacije varijabli i tako doći do bazisa od svojstvenih vektora

$$\langle\, \varphi\theta r \mid nlm\rangle = \bar{R}_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{9.2.25}$$

(pišemo $\bar{R}$ da bismo ove radijalne funkcije razlikovali od njihovih pandana u vodoniku sličnom atomu). Funkcije (9.2.25) odgovaraju svojstvenim vrednostima

$$E_n = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega \tag{9.2.26}$$

[9.2.1] Po želji videti str. 90-92 u knjizi iz 9.1.3.

(n, kvantni broj energije, isti je kao u (9.2.21), ali sad se n_q, $q = x, y, z$ ne pojavljuju).

Nećemo izračunavati vid radijalnih funkcija $\bar{R}_{nl}(r)$. Samo ćemo postaviti sledeće pitanje: Koje vrednsti za l mogu da se pojave zajedno sa datim n (pitanje kompatibilnosti vrednosti kvantnih brojeva)? Odgovor nam je potreban već i za to da znamo kako da prebrojavamo vektore $|\, nlm\,\rangle$ u pomenutom bazisu.

9.2.6 Parnost energetskih nivoa

Bacimo pogled na vid svojstvenih funkcija hamiltonijana linijskog oscilatora, tj. na (9.2.19) i (9.2.17) i zapitajmo se da li ove funkcije imaju određenu parnost. Iz (9.2.10) se vidi da se $x \to -x$ svodi na $s \to -s$, a primeri (9.2.18) sugerišu da $\hat{H}_{n_x}(s)$ ima parnost $(-1)^{n_x}$. Gledajući (9.2.17) i imajući u vidu da je $\frac{d}{ds}$ neparan operator, te da je $\frac{d^{n_x}}{ds^{n_x}}$ operator čija je parnost $(-1)^{n_x}$, zaključujemo da stvarno svaka funkcija $H_{n_x}(s)$ ima parnost $(-1)^{n_x}$. Iz (9.2.19) vidimo da i ψ_{n_x} ima istu parnost $(-1)^{n_x}$. Dakle, (nedegenerisani) energetski nivoi linijskog oscilatora imaju određenu parnost i to parnost kvantnog broja energije.

Pitamo se da li i energetski nivoi trodimenzionalnog harmonijskog oscilatora imaju određenu parnost.

Iz (9.2.23) možemo odmah da zaključimo da svojstvena funkcija $\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z)$ zaista ima određenu parnost i to $(-1)^{n_x+n_y+n_z} = (-1)^n$. Tako da i u ovom slučaju imamo isti zaključak: (degenerisani) *energetski nivoi harmonijskog oscilatora imaju određenu parnost i to parnost kvantnog broja energije.* Drugim rečima, kako god odabrali svojstveni vektor $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{V}(E_n)$ (neka linearna kombinacija funkcija (9.2.23) sa fiksiranim n), imamo $\hat{\mathcal{J}}_p \,|\,\psi\,\rangle = (-1)^n \,|\,\psi\,\rangle$.

Sad možemo da se vratimo pitanju iz prethodnog paragrafa. Vektor $|\, nlm\,\rangle$ ima parnost $(-1)^l$ (jer je to parnost sfernog harmonika iz (9.2.25)). S druge strane, zaključili smo da iz $\hat{H}\,|\, nlm\,\rangle = E_n\,|\, nlm\,\rangle$ sledi da je parnost vektora $|\, nlm\,\rangle$ jednaka $(-1)^n$. Dakle, l i n moraju imati jednaku parnost ili, drugim rečima, za dato n dolaze u obzir samo vrednosti za l iste parnosti kao što ima n.

Ne možemo ovako jednostavnim rezonovanjem doći do kompletnog odgovora na postavljeno pitanje. Sada ćemo formulisati potpuni odgovor (a dokaz ćemo dati tek u glavi 11).

Za n parno, moguće vrednosti za l:

$$l = n, n-2, ..., 0 \quad (\frac{n+2}{2} \text{ vrednosti}); \tag{9.2.27a}$$

Za n neparno, imamo

$$l = n, n-2, ..., 1 \quad (\frac{n+1}{2} \text{ vrednosti}). \tag{9.2.27b}$$

Zadatak 9.2.5 Dokazati da je broj mogućih vrednosti za l kada je dato n, zaista kao što je dato u zagradi u (9.2.27).

Dakle, sa potpune klasifikacije stanja $\{|\, n_x n_y n_z\,\rangle | n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, ...\}$ možemo da pređemo na potpunu klasifikaciju stanja $\{|\, nlm\,\rangle | m = -l, -l+1, ..., l; l = n, n-2, ...; n = 0, 1, 2, ...\}$.

Zadatak 9.2.6 Prodiskutovati sličnost između dve pomenute potpune klasifikacije stanja za trodimenzionalni harmonijski oscilator s jedne strane, i ravnih i sfernih talasa sa druge.

9.2.7 Energetska reprezentacija

U § 2.9.5 definisali smo pojam energetske reprezentacije, ali sve do sada nismo imali sasvim adekvatan primer za ilustraciju tog pojma. (Primer iz prethodnog odeljka nije sasvim adekvatan, jer hamiltonijan vodoniku sličnog atoma ima i kontinualan spektar, pa se ne uklapa u ograničenja na čisto diskretni spektar koje smo učinili u § 2.9.5 — doduše, razlog za ograničenja je samo jednostavnost.)

Rezimirajući rezultate ovog odeljka, možemo reći da harmonijski oscilator u tri dimenzije daje (bar) dve energetske reprezentacije. Jedna je

$$\{|\, n_x, n_y, n_z\,\rangle \mid n_q = 0, 1, 2, ...;\ q = x, y, z\} \subset \mathcal{H}_o, \tag{9.2.28a}$$

a druga

$$\{|\, nlm\,\rangle \mid m = -l, -l+1, ..., l;\ l = n, n-2, ...; n = 0, 1, 2, ...\} \subset \mathcal{H}_o. \tag{9.2.29a}$$

Potpuni skup kompatibilnih opservabli koji definiše (9.2.28a) kao svoj zajednički svojstveni bazis glasi:

$$\hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z, \tag{9.2.28b}$$

a za (9.2.29a) analogni skup je

$$\hat{H}, \hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z. \tag{9.2.29b}$$

U (9.2.28b) $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$ ne pripada potpunom skupu opservabli, ali jeste njihova funkcija, analogno kao što u slučaju slobodne čestice $\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$ ne pripada potpunom skupu $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ koji definiše ravne talase (uporediti Zadatak Z 9.2.6).

9.3 Identične čestice i kvantne statistike

U ovom odeljku ćemo započeti izučavanje implikacija veoma fundamentalne i jednostavne činjenice da se elementarne čestice u prirodi pojavljuju u (manjem ili većem broju) potpuno nerazličivih ili identičnih primeraka. Pokazaćemo kako dosledno kvantnomehaničko opisivanje sistema od više identičnih čestica iziskuje važenje jednog novog superselekcionog pravila, koje ćemo formulisati u vidu VIII (i ujedno poslednjeg) postulata kvantne mehanike.

Pri proučavanju sistema identičnih čestica od osnovnog je značaja reprezentacija grupe permutacija S_N (koja permutuje N identičnih čestica) u $\mathcal{H}^{(u)}_{1...N}$. Matematički tretman operatora permutacija biće izložen dosta detaljno, jer je neophodan ne samo za kvantitativno opisivanje identičnih čestica u prostoru stanja sa određenim brojem čestica (tj. u tzv. formalizmu prve kvantizacije), nego i za razumevanje formalizma druge kvantizacije (glava 11), u kome se pomenuti sistemi opisuju u prostoru stanja u kome broj čestica uzima sve moguće vrednosti.

9.3.1 Pojam identičnih čestica

Jednu od čudesnih i svojevresnih pojava mikrosveta, bez pandana u klasičnoj fizici, nalazimo u pojmu *identičnih* ili *narazličivih čestica*. Osobina identičnosti znači da čestice nemaju nijedne inherentne ili *a priori* osobine po kojoj bi se razlikovale dve od njih, osim ako su u različitom stanju (što ubrajamo u spoljašnje, promenljive, *a posteriori* osobine).

Na primer, svi elektroni su identične čestice. Dok svaka dva klasična objekta možemo da razlikujemo po nekoj osobini (ako dovoljno pažljivo vršimo posmatranja), svaka dva elektrona su potpuno jednaka po svojim inherentnim, tj. stalnim i nepromenljivim osobinama. Takvih osobina u stvari ima samo nekoliko: masa, električni naboj, spin, orbitni i spinski giromagnetski faktor itd.

Pojam identičnih čestica je od važnosti samo za elementarne čestice. Ako vodimo računa o identičnosti elementarnih čestica, samim tim smo u potpunosti uzeli u obzir i identičnost složenih kvantnih sistema. Naime, identični složeni sistemi se sastoje od identičnih elementarnih čestica, a identičnost je od važnosti upravo u kontekstu kompozicije čestica u složene sisteme.

Postavlja se pitanje da li kvantnomehaničko opisivanje sistema složenog od više identičnih čestica može biti isto kao u slučaju različivih čestica, koji smo do sada proučavali.

Odmah se nameće odgovor da bi svaki operator koji nije simetričan u odnosu na identične čestice, tj. koji, na neki način, "razlikuje" nerazličive čestice, morao biti lišen fizičkog smisla. Međutim, II Postulat o opservablama (§ 2.1.3) u principu pridaje fizicki smisao svakoj opservabli u prostoru stanja kvantnog sistema. Znači, preostaje samo mogućnost da pogodno odaberemo prostor stanja (uporediti kraj od § 7.5.3).

U narednim paragrafima ovog odeljka naći ćemo načina da formulišemo novi (i poslednji) postulat kvantne mehanike, koji će ideju identičnosti čestica inkorporirati u kvantnomehanički formalizam na logički prihvatljiv, i eksperimentalno potvrđen način.

Ali moramo poći od (intuitivno nabačenih) simetričnih operatora, jer se oni neposredno nadovezuju na ideju nemogućnosti razlikovanja čestica. Analiziraćemo ovaj pojam prvo za dve identične čestice, a zatim za N identičnih čestica.

9.3.2 Simetrični operatori za dve identične čestice — algebarska definicija

Da bismo simetrične operatore (opservable i transformacije simetrije) precizno definisali, ograničimo se za sada na dvočestični orbitni prostor stanja $\mathcal{H}_{12}^{(o)} = \mathcal{H}_1^{(o)} \otimes \mathcal{H}_2^{(o)}$.

Definišimo izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}$ orbitnog prostora stanja prve čestice $\mathcal{H}_1^{(o)}$ na analogni prostor druge čestice $\mathcal{H}_2^{(o)}$ sledećim preslikavanjem bazisa na bazis:

$$\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)} \mid \mathbf{r}_1 \rangle = \mid \mathbf{r}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r}_1 \rangle, \forall \mathbf{r}_1 \tag{9.3.1}$$

(tj. lik u $\mathcal{H}_2^{(o)}$ je određen istim vrednostima koordinata kao što ih ima prolik $\mid \mathbf{r}_1 \rangle$ u $\mathcal{H}_1^{(o)}$). Kaže se da su operatori $\hat{A}_1$ u $\mathcal{H}_1^{(o)}$ i $\hat{A}_2$ u $\mathcal{H}_2^{(o)}$ *ekvivalentni* po $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}$ ako[9.3.1]

$$\hat{A}_2 = \hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)} \hat{A}_1 \hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)-1}. \tag{9.3.2}$$

Zadatak 9.3.1 a) Pokazati da se isti izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}$ može ekvivalentno definisati pomoću (uopštenog) svojstvenog bazisa impulsa na sledeći način:$\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)} \mid \mathbf{p}_1 \rangle = \mid \mathbf{p}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{p}_1 \rangle, \forall \mathbf{p}_1$ (tj. analogno kao u (9.2.1)) i pokazati da su osnovni skupovi opservabli $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2$ u $\hat{H}_1^{(o)}$ i $\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_2$ u $\hat{H}_2^{(o)}$ ekvivalentni po $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}$.

[9.3.1] Izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}$ se na isti način definiše i za različive čestice. Naime, neidentične čestice takođe mogu biti u "istom". stanju, to u stvari znači da su čestice u stanjima izomorfnim po $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}$. Zato smo u § 2.6.6 govorili o ekvivalentnim (baš u odnosu na $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}$) orbitnim prostorima stanja za različite čestice.

b) Pokazati da su i drugi osnovni operatori kao $\hat{\mathbf{l}}_1, \hat{\mathcal{J}}_1^{(p)}$ i $\hat{\mathcal{J}}_1^{(v)}$ takođe ekvivalentni po $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}$ sa svojim pandanima $\hat{\mathbf{l}}_2, \hat{\mathcal{J}}_2^{(p)}, \hat{\mathcal{J}}_2^{(v)}$.

Praktičnije je umesto sa $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}$, koji preslikava prostor stanja jedne čestice na prostor stanja druge, koristiti se tzv. *operatorom izmene* (engleski: exchange operator, čitati; eksčejndž oupe-rejte). On je definisan u dvočestičnom prostoru $\mathcal{H}_{12}^{(o)}$ tako da u svakom nekorelisanom faktoru uzajamno zamenjuje faktor-vektore. Drugim rečima, obeležavajući operator izmene sa $\hat{E}$, imamo po definiciji

$$\hat{E}(|\,\mathbf{r}_1\,\rangle \otimes |\,\mathbf{r}_2\,\rangle) = (\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}\,|\,\mathbf{r}_2\,\rangle) \otimes (\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}\,|\,\mathbf{r}_1\,\rangle), \quad \forall \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2. \tag{9.3.3}$$

Zadatak 9.3.2 Pokazati da za svaki nekorelisani vektor ili nekorelisani uopšteni vektor $|\,\psi_1\,\rangle \otimes |\,\psi_2\,\rangle$ u $\mathcal{H}_{12}^{(o)}$ važi

$$\hat{E}(|\,\psi_1\,\rangle \otimes |\,\psi_2\,\rangle) = (\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)-1}\,|\,\psi_2\,\rangle) \otimes (\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(o)}\,|\,\psi_1\,\rangle). \tag{9.3.4}$$

(Indikacija: Razviti $|\,\psi_1\,\rangle$ i $|\,\psi_2\,\rangle$ po bazisima $\{|\,\mathbf{r}_1\,\rangle | \forall \mathbf{r}_1\}$ odnosno $\{|\,\mathbf{r}_2\,\rangle | \forall \mathbf{r}_2\}$ i iskoristiti (9.3.3) i bilinearnost direktnog proizvoda.)

Operator kinetičke energije za dve identične (ili neidentične) čestice glasi

$$\hat{T}_1 + \hat{T}_2 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m}. \tag{9.3.5}$$

Zadatak 9.3.3 Pokazati da važi

$$\hat{E}(\hat{T}_1 + \hat{T}_2)\hat{E}^{-1} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2. \tag{9.3.6a}$$

Jednakost (9.3.6a) je očigledno ekvivalentna sa

$$[\,\hat{T}_1 + \hat{T}_2, \hat{E}\,] = 0. \tag{9.3.6b}$$

Operator dvočestične interakcije $\hat{V}_{12}$ za dve identične čestice takođe uvek (kako god eksplicitno glasio) zadovoljava analogone od (9.3.6):

$$\hat{E}\hat{V}_{12}\hat{E}^{-1} = \hat{V}_{12} \Leftrightarrow [\hat{V}_{12}, \hat{E}] = 0. \tag{9.3.7a,b}$$

Analogno važi za operator prostorne inverzije $\hat{\mathcal{J}}_1^{(p)} \otimes \hat{\mathcal{J}}_2^{(p)}$i vremenske inverzije $\hat{\mathcal{J}}_1^{(v)} \otimes \hat{\mathcal{J}}_2^{(v)}$.

Za bilo koji operator $\hat{B}$ u prostoru stanja $\mathcal{H}_{12}^{(o)}$ dve identične čestice kaže se da je *simetričan operator* ako

$$\boxed{[\,\hat{B}, \hat{E}\,] = 0}. \tag{9.3.8}$$

9.3.3 Simetrični operatori za dve identične čestice — geometrijska definicija

Mi smo u (9.3.8) simetrične operatore karakterisali algebarski, tj. njihovim komutacionim odnosom sa operatorom izmene $\hat{E}$. Sada ćemo proučiti geometrijsko naličje ove definicije.

Operator izmene je očigledno involutivan i stoga ne samo unitaran operator (transformacija), već je i opservabla (uporediti analogni slučaj sa $\hat{\mathcal{J}}_p$ u dokazu teoreme T 8.1.3). Opservabla $\hat{E}$ ima svojstvene vrednosti $+1$ i -1 i definiše svojstvenu dekompoziciju

$$\boxed{\mathcal{H}_{12}^{(o)} = \mathcal{V}_s \oplus \mathcal{V}_a}. \tag{9.3.9}$$

Vektori $\mid \psi_{12} \rangle \in \mathcal{H}_{12}^{(o)}$ koji zadovoljavaju svojstvenu jednakost $\hat{E} \mid \psi_{12} \rangle = \mid \psi_{12} \rangle$ nazivaju se *simetrični* vektori, a vektori $\mid \phi_{12} \rangle \in \mathcal{H}_{12}^{(o)}$ koji su rešenja jednačine $\hat{E} \mid \phi_{12} \rangle = - \mid \phi_{12} \rangle$ *antisimetrični vektori*. Odgovarajući svojstveni potprostori $\mathcal{V}_s$, odnosno $\mathcal{V}_a$, nazivaju se kratko *simetrični*, odnosno *antisimetrični potprostori*.

Zadatak 9.3.4 Pokazati da u kvantnomehaničkom problemu dve čestice, kada pišemo $\mathcal{H}_{12}^{(o)} = \mathcal{H}_{\mathrm{CM}} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{R\check{C}}}$ (uporediti (4.5.19)), ako je $m_1 = m_2$ važi:

$$\hat{E} = \hat{I}_{\mathrm{CM}} \otimes \hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{R\check{C}}}^{(p)}, \quad \mathcal{V}_s = \mathcal{H}_{\mathrm{CM}} \otimes \mathcal{V}_+^{(p)}, \quad \mathcal{V}_a = \mathcal{H}_{\mathrm{CM}} \otimes \mathcal{V}_-^{(p)}, \tag{9.3.10a,b,c}$$

gde je $\hat{I}_{\mathrm{CM}}$ identični operator u $\mathcal{H}_{\mathrm{CM}}$, $\hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{R\check{C}}}^{(p)}$ je operator prostorne inverzije za relativnu česticu, a $\mathcal{V}_\pm^{(p)}$ su svojstveni potprostori od $\hat{\mathcal{J}}_{\mathrm{R\check{C}}}^{(p)}$, koji odgovaraju svojstvenim vrednostima ± 1.

Obeležićemo sa $\hat{S}$ i $\hat{A}$ projektore na $\mathcal{V}_s$ odnosno na $\mathcal{V}_a$, tj. svojstvene projektore od $\hat{E}$ koji odgovaraju svojstvenim vrednostima $+1$, odnosno -1. Imamo:

$$\boxed{\hat{S} = \tfrac{1}{2}(\hat{I} + \hat{E}), \qquad \hat{A} = \tfrac{1}{2}(\hat{I} - \hat{E})}. \tag{9.3.11a,b}$$

Zadatak 9.3.5 a) Dokazati da su $\hat{S}$ i $\hat{A}$ projektori, i to komplementarni (tj. da su ortogonalni i da se sabiraju u identični operator $\hat{I}$).

b) Dokazati da su $\hat{S}$ i $\hat{A}$ svojstveni projektori od $\hat{E}$.

Mi ćemo $\hat{S}$ i $\hat{A}$ nazivati *simetrizatorom* odnosno *antisimetrizatorom*[9.3.2]. Razlog za termin je u tome što proizvoljni vektor kad se projektuje sa $\hat{S}$, odnosno sa $\hat{A}$, postaje simetričan, odnosno antisimetričan vektor.

Podsetimo se sad matematičke činjenice da linearan (ili antilinearan) operator $\hat{B}$ komutira sa opservablom $\hat{E}$ ako i samo ako komutira sa svakim njenim svojstvenim projektorom, tj. sa $\hat{S}$ i $\hat{A}$ (S 2.4.2). A ovo je slučaj ako i samo ako su potprostori $\mathcal{V}_s$ i $\mathcal{V}_a$ invarijantni za $\hat{B}$ (S 2.4.3).

Dakle, *simetričnost* operatora $\hat{B}$ u $\mathcal{H}_{12}^{(o)}$ možemo *ekvivalentno* definisati zahtevom da su za $\hat{B}$ *invarijantni* kako simetrični potprostor $\mathcal{V}_s$, tako i antisimetrični potprostor $\mathcal{V}_a$.

Zadatak 9.3.6 Pokazati da je dovoljno zahtevati da jedan od potprostora $\mathcal{V}_s, \mathcal{V}_a$ bude invarijantan za $\hat{B}$, onda je drugi nužno invarijantan.

Na kraju ovog paragrafa proširimo dobijene rezultate na ukupne prostore stanja. Definišimo izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(s)}$ spinskog faktor-prostora $\mathcal{H}_1^{(s)}$ na $\mathcal{H}_2^{(s)}$ $(s_1 = s_2 = \frac{1}{2})$ pomoću standardnih bazisa:

$$\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}^{(s)} \mid \pm \rangle_1 = \mid \pm \rangle_2. \tag{9.3.12}$$

[9.3.2] U nekim udžbenicima kvantne mehanike simetrizator i antisimetrizator se definišu bez faktora $\frac{1}{2}$ (odnosno bez faktora $\frac{1}{N}$ u slučaju N čestica).

Onda je očigledno da je $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{J}}^{(o)}_{2\leftarrow 1} \otimes \hat{\mathcal{J}}^{(s)}_{2\leftarrow 1}$ (pišemo $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}$ umesto $\hat{\mathcal{J}}^{(u)}_{2\leftarrow 1}$) izomorfizam ukupnog prostora stanja prve čestice $\mathcal{H}^{(u)}_1 = \mathcal{H}^{(o)}_1 \otimes \mathcal{H}^{(s)}_1$ na analogni prostor druge čestice $\mathcal{H}^{(u)}_2$.

Operator izmene $\hat{E}$ onda možemo proširiti na ukupni prostor $\mathcal{H}^{(u)}_{12}$ dve identične čestice (pišemo opet $\hat{E}$ umesto $\hat{E}^{(u)}$):

$$\hat{E}(\mid \psi_1 \rangle \otimes \mid \psi_2 \rangle) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{J}}^{-1}_{2\leftarrow 1} \mid \psi_2 \rangle \otimes \hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1} \mid \psi_1 \rangle, \tag{9.3.13}$$

i to za svaka dva vektora $\mid \psi_1 \rangle \in \mathcal{H}^{(u)}_1$ $\mid \psi_2 \rangle \in \mathcal{H}^{(u)}_2$.

Čitaocu je verovatno očigledno da su sad potpuni skupovi opservabli $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{s}}_1$ i $\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{p}}_2, \hat{\mathbf{s}}_2$ ekvivalentni po $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow 1}$.

Po definiciji, operator $\hat{B}$ u $\mathcal{H}^{(u)}_{12}$ je simetričan ako komutira sa ukupnim operatorom izmene:

$$[\,\hat{B}, \hat{E}\,] = 0. \tag{9.3.14}$$

9.3.4 Simetrični operatori za N identičnih čestica

U ovom paragrafu uopštićemo rezultate paragrafa § 9.3.2 na složeni kvantni sistem od N identičnih čestica.

Neka je $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N} = \mathcal{H}^{(u)}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}^{(u)}_N$. Za svaka dva različita indeksa $i < j \leq N$ postoji izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow i}$ prostora $\mathcal{H}^{(u)}_i$ na $\mathcal{H}^{(u)}_j$ definisan kao u § 9.3.2. Ovakvih izomorfizama između po dva faktor-prostora ima toliko koliko ima različitih parova indeksa $1, ..., N$. Taj broj je, kao što je poznato, jednak $\frac{N(N-1)}{2}$. Ovi izomorfizmi su povezani *tranzitivnošću*, na primer $\hat{\mathcal{J}}_{k\leftarrow j}\hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow i} = \hat{\mathcal{J}}_{k\leftarrow i}$ itd.

S druge strane, za N čestica imamo grupu od $N!$ *permutacija* (za $N = 2$ je $N! = 2$, i ova grupa se sastoji od $\hat{I}$ i $\hat{E}$). One se obično pišu na sledeći način

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \ldots & N \\ p_1 & p_2 & \ldots & p_N \end{pmatrix}, \quad \forall p \in S_N. \tag{9.3.15}$$

(za prolik i lik je p_i, koji je takođe broj od 1 do N). S_N se naziva simetričnom grupom ili permutacionom grupom N-tog reda.

Zadatak 9.3.7 Pokazati da S_N može da se izomorfno reprezentuje u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$ pridruživanjem[9.3.3]:

$$p \to \mathcal{P} : \hat{P} \mid \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \mid \mathbf{r}_{p_1^{-1}}, \mathbf{r}_{p_2^{-1}}, \ldots, \mathbf{r}_{p_N^{-1}} \rangle, \ \forall \mathbf{r}_1, \ldots, \forall \mathbf{r}_N, \tag{9.3.16}$$

gde je p^{-1} inverzna permutacija od p (a p_i^{-1} je lik i po p^{-1}).

Zadatak 9.3.8 Pokazati da je svaki operator $\hat{P}$ iz (9.3.16) unitaran u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$.

[9.3.3] Za dokazivanje pomenute izomorfnosti ključno je da se uoči da je $\hat{P} \mid \ldots, \mathbf{r}_{p_i}, \ldots \rangle$, a ne recimo $\mid \ldots, \mathbf{r}_{p_{p_i^{-1}}}, \ldots \rangle$. Naime, premisa definicije (9.3.16) je da je na levoj strani od (9.3.16) zadat način kako se svakom $i = 1, \ldots, N$ pridružuju po tri realna broja $\mathbf{r}_i$; na desnoj strani od (9.3.16) onda imamo složeno pridruživanje (složenu funkciju) $\mathbf{r}_{p_i^{-1}}$. Na levoj strani od $\hat{P} \mid \ldots, \mathbf{r}_{p_i}, \ldots \rangle = \ldots$ dato pridruživanje je već složeno: prvo se na i primeni p', pa se tek onda uzme $\mathbf{r}_{p'_i}$ po prethodno zadatom preslikavanju $i \to \mathbf{r}_i$. Znači, nezavisno promenljiva je i i na nju treba primeniti p^{-1}. Pridruživanje $p \to \hat{P}$ dato sa (9.3.16) specijalni je slučaj izomorfnog prenošenja transformacija iz domena funkcija na skup funkcija: $\hat{T}f(s)) \stackrel{\text{def}}{=} f(T^{-1}s)$.

Zadatak 9.3.9 Neka je $\{| n \rangle_1 \mid \forall n\}$ bazis u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ i prenesimo ga izomorfizmima $\hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow 1}$ $(j = 2, \ldots, N)$ u ostale jednočestične prostore. Uz $| n \rangle_j \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow 1} \mid n \rangle_1$, bazisi u faktor-prostorima daju bazis $\{| n_1 \rangle_1 \ldots | n_N \rangle_N \mid \forall n_i\}$ u $\mathcal{H}_{1\ldots N}^{(u)}$. Pokazati da važi

$$\hat{P} \mid n_1 \rangle_1 \ldots \mid n_N \rangle_N = \mid n'_1 \stackrel{\text{def}}{=} n_{p_1^{-1}} \rangle_1 \ldots \mid n'_N \stackrel{\text{def}}{=} n_{p_N^{-1}} \rangle_N, \tag{9.3.17}$$

gde je na primer n određena vrednost kvantnog broja n, i to ona koja je na prvom mestu itd.

Neka je p_{ij} transpozicija indeksa i i j (specijalni slučaj permutacije), $1 \leq i < j \leq N$. Onda (9.3.16) daje za odgovarajući operator $\hat{P}_{ij}$:

$$\mathcal{P}_{ij} \mid .., \mathbf{r}_i, \ldots, \mathbf{r}_j, \ldots \rangle = \mid \ldots, \mathbf{r}_j, \ldots, \mathbf{r}_i, \ldots \rangle \tag{9.3.18}$$

(jer $p^{-1} = p$). Naravno, možemo takođe da pišemo

$$\hat{P}_{ij} \mid \ldots, \mathbf{r}_i, \ldots, \mathbf{r}_j, \ldots \rangle = \ldots \otimes \hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow i}^{-1} \mid \mathbf{r}_j \rangle \otimes \ldots \otimes \hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow i} \mid \mathbf{r}_i \rangle \otimes \ldots \tag{9.3.19}$$

(radijus vektori koji nisu ispisani ostaju nepromenjeni).

Pošto se svaka permutacija faktoriše u transpozicije, svaku od $N!$ permutacija možemo sukcesivnom primenom (9.3.19) da izrazimo pomoću $\frac{N(N-1)}{2}$ izomorfizama $\hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow i}$ između po dva faktor-prostora. (Ali to nije sasvim jednostavno napisati u jednoj formuli, jer više transpozicija može da deluje na isti indeks.)

Dakle, ovim putem uopštavamo "izjednačavanje" i-te i j-te čestice (na šta se svodi uloga od $\hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow i}$) na N čestica. Osnovni skupovi opservabli $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{s}}_1,\ \hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{p}}_2, \hat{\mathbf{s}}_2, \ldots \hat{\mathbf{r}}_N, \hat{\mathbf{p}}_N, \hat{\mathbf{s}}_N$ su ekvivalentni. Isto tako i drugi operatori u faktor-prostorima koji su iste funkcije osnovnog skupa opservabli (ili se algebarski jednako odnose prema njima, kao što su $\hat{\mathcal{J}}_p$ i $\hat{\mathcal{J}}_v$).

U hamiltonijanu

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{T}_i + \sum_{i<j} \hat{V}_{ij} \tag{9.3.20}$$

N identičnih čestica svi operatori kinetičke energije $\hat{T}_i$ su jednake funkcije osnovnog skupa opservabli i svi operatori dvočestične interakcije $\hat{V}_{ij}$ su takođe jednake funkcije parova osnovnih opservabli $\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i, \hat{\mathbf{s}}_i; \hat{\mathbf{r}}_j, \hat{\mathbf{p}}_j, \hat{\mathbf{s}}_j$. Kao što smo rekli, dotični operatori su stoga ekvivalentni i hamiltonijan zadovoljava

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1} = \hat{H} \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{P}] = 0,\ \forall p \in S_N \tag{9.3.21}$$

(to važi i posebno za ukupni operator kinetičke energije i posebno za ukupni operator interakcije). Analogne relacije važe za ukupne aditivne operatore kao što su $\hat{\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{l}}_i$, $\hat{\mathbf{S}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{s}}_i$, $\hat{\mathbf{J}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{j}}_i$, kao i za multiplikativne operatore kao što su $\hat{\mathcal{J}}_{1,\ldots,N}^{(p)} = \otimes_{i=1}^{N} \hat{\mathcal{J}}_i^{(p)}$ i $\hat{\mathcal{J}}_{1,\ldots,N}^{(v)} = \otimes_{i=1}^{N} \hat{\mathcal{J}}_i^{(v)}$.

Za neki operator $\hat{B}$ u $\mathcal{H}_{1\ldots N}^{(u)}$ kaže se da je *simetričan operator* ako komutira sa svim permutacijama, tj. ako važi

$$\boxed{[\hat{B}, \hat{P}] = 0,\ \forall p \in S_N} \tag{9.3.22}$$

($\hat{P}$ reprezentuje p u $\mathcal{H}_{1\ldots N}^{(u)}$ preko pridruživanja (9.3.17) ili (9.3.16)).

9.3.5 Simetrični operatori za N identičnih čestica — geometrijska definicija

Što se tiče geometrijske karakterizacije N-čestičnih simetričnih operatora, potprostori $\mathcal{V}_s$ i $\mathcal{V}_a$ iz paragrafa § 9.3.3 uopštavaju se u tzv. *potprostore maksimalne simetrije*, a to su u stvari višestruki ireducibilni invarijantni potprostori[9.3.4] za permutacionu grupu S_N, zapravo za njenu reprezentaciju u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$. Ovi potprostori se definišu u punoj analogiji sa odgovarajućim potprostorima za rotacionu grupu[9.3.5], tj. sa potprostorima koje smo u § 6.3 nazivali "ormari sa fiokama".

Za $N=2$, postoje samo dva ovakva potprostora: $\mathcal{V}_s$ i $\mathcal{V}_a$. Za $N=3$ ima ih više, ali nas će stvarno zanimati samo direktna uopštenja od $\mathcal{V}_s$ i $\mathcal{V}_a$.

Za *vektor* $\mid\psi\,\rangle \in \mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$ kaže se da je *simetričan* ako je

$$\hat{P}\mid\psi\,\rangle = \mid\psi\,\rangle,\ \forall p\in S_N, \tag{9.3.23}$$

dok se *antisimetrični vektori* $\mid\psi\,\rangle \in \mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$ definišu jednakostima

$$\hat{P}\mid\psi\,\rangle = (-1)^p\mid\psi\,\rangle,\ \forall p\in S_N, \tag{9.3.24}$$

gde je $(-1)^p$ tzv. parnost[9.3.6] permutacije p. U literaturi se ponekad u istom smislu govori o potpuno simetričnim i potpuno antisimetričnim vektorima ("potpun", kao i "maksimalna" u 9.3.4, iskazuje da se radi o celoj grupi S_N, a ne o njenoj podgrupi).

Skup svih simetričnih vektora u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$ je tzv. *simetrični potprostor* $\mathcal{V}_a$, a svi antisimetrični vektori sačinjavaju tzv. *antisimetrični potprostor* $\mathcal{V}_a$.

Projektor na $\mathcal{V}_s$ nazivaćemo *simetrizatorom* i obeležavaćemo ga sa $\hat{S}$. On glasi:

$$\boxed{\hat{S} = \frac{1}{N!}\sum_{p\in S_N}\hat{P}}. \tag{9.3.25}$$

Projektor $\hat{A}$ na antisimetrični potprostor $\mathcal{V}_a$ nazivaćemo *antisimetrizatorom*. On ima vid

$$\boxed{\hat{A} = \frac{1}{N!}\sum_{p\in S_N}(-1)^p\hat{P}}. \tag{9.3.26}$$

Zadatak 9.3.10 Dokazati da su $\hat{S}$ i $\hat{A}$ projektori i to uzajamno ortogonalni.

[9.3.4] Pridev "maksimalna" ovde označava da se radi o celoj permutacionoj grupi, a ne o nekoj njenoj pravoj podgrupi (što se takođe ponekad koristi).

[9.3.5] Rotaciona grupa je beskonačna Lie-eva grupa sa (hermitskim) vektorskim generatorom $\hat{\mathbf{K}}$. A permutaciona grupa S_N je konačna grupa. Analogija je u rezultatima: u "ormarima"i "fiokama", u dimenzionalnim odnosima, ekvivalentnostima, itd. Samo dobijanje dotičnih potprostora je u slučaju konačne grupe sasvim drugačije. Definišu se neposredno sami projektori na ormare i fioke i to kao linearne kombinacije samih operatora koji reprezentuju transformacije iz dotične konačne grupe. Koeficijenti su pri tome u slučaju "ormara" vrednosti karaktera ireducibilne reprezentacije, a u slučaju "fioka" matrični elementi standardne reprezentacije (i jedno i drugo kompleksno konjugovano).

[9.3.6] Kao što je poznato u teoriji simetrične grupe S_N, faktorizacija permutacije u transpozicije je nejednoznačna, čak je i broj faktora nejednoznačan, ali parnost broja faktora jeste jednoznačna i ona se naziva parnošću permutacije i piše $(-1)^p$. Dakle, $(-1)^p = \pm 1$.

Zadatak 9.3.11 Dokazati da je oblast likova simetrizatora prostor $\mathcal{V}_s$:

$$R(\hat{S}) = \mathcal{V}_s. \tag{9.3.27}$$

(Indikacija: Pokazati prvo $\mathcal{V}_s \subseteq R(\hat{S})$ primenom $\hat{S}$ na simetrične vektore. Zatim pokazati $R(\hat{S}) \subseteq \mathcal{V}_s$ demonstrirajući da je $\hat{S} \mid \psi \rangle \in \mathcal{V}_s, \ \forall \mid \psi \rangle \in \mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$.)

Zadatak 9.3.12 Dokazati

$$R(\hat{A}) = \mathcal{V}_a. \tag{9.3.28}$$

Pošto simetričan linearni operator $\hat{B}$ (po definiciji) komutira su svakim operatorom permutacija $\hat{P}$, a $\hat{S}$ i $\hat{A}$ su linearne kombinacija tih operatora, $\hat{B}$ komutira i sa $\hat{S}$ i $\hat{A}$. Projektori na ostale potprostore maksimalne simetrije, obeležimo ih sa $\hat{M}_q$, $q = 1, 2, \ldots, Q$, su takođe linearne kombinacije operatora $\hat{P}$ (videti 9.3.5 i možda referencu u 8.3.10), pa $\hat{B}$ komutira i sa svakim od njih. Štaviše, i projektori na potprostore koji su analogoni od $\mathcal{V}_{km}$ potprostora (na "fioke" iz C 6.2) su takođe linearne kombinacije operatora $\hat{P}$, te $\hat{B}$ komutira i sa svakim od njih. Dakle, svi odgovarajući potprostori su invarijantni za $\hat{B}$, tj. $\hat{B}$ se redukuje u svakom od njih. I operatori koji su analogoni od $\hat{K}_\pm$ iz § 6.3 (tj. operatori koji preslikavaju jednu "fioku" na drugu unutar istog "ormara" takođe su linearne kombinacije operatora permutacija $\hat{P}$, te $\hat{B}$ komutira sa njima. Stoga se $\hat{B}$ u svim "fiokama" istog "ormara" redukuje u uzajamno ekvivalentne operatore.

Izloženi potreban uslov da se linearan operator ako je simetričan redukuje u svakom analogonu $\mathcal{V}_{km}$ potprostora i to u ekvivalentne operatore je i dovoljan uslov za simetričnost operatora $\hat{B}$. Stoga ovaj uslov predstavlja *geometrijsku definiciju simetričnog* linearnog operatora.

Pokazaće se da su za nas od važnosti u stvari samo $\mathcal{V}_s$ i $\mathcal{V}_a$. U prvom se S_N reprezentuje identičnom reprezentacijom $p \to \hat{I}_s, \forall p \in S_N$; a u drugom tzv. alternativnom (ireducibilnom) reprezentacijom $p \to (-1)^p \hat{I}_a, \forall p \in S_N$. Znači, homomorfni likovi od S_N su Abel-ove grupe $\{I_a\}$ odnosno $\{\hat{I}_a, -\hat{I}_a\}$, stoga, kao što je poznato, svaki njihov ireducibilni potprostor mora biti jednodimenzionalan. Drugim rečima, $\mathcal{V}_s$ i $\mathcal{V}_a$ imaju samo po jednu "fioku".

9.3.6 Postulat o identičnim česticama

Detaljno smo proučili matematički sadržaj simetričnosti linearnog operatora $\hat{B}$ i na mala vrata smo provukli ideju da se nekako moramo ograničiti na simetrične operatore pri opisivanju sistema identičnih čestica. Krajnje je vreme da precizno regulišemo logički status pomenute nove ideje u kvantnoj mehanici.

Zadatak 9.3.13 Neka su $\hat{M}_q, q = 1, 2, \ldots, Q$, projektori na ostale potprostore maksimalne simetrije (ne na $\mathcal{V}_s$ i $\mathcal{V}_a$). Pokazati da za svaki izbor realnih brojeva $d_s, d_a, d_q, \ q = 1, \ldots, Q$, opservabla

$$\hat{D} \stackrel{\text{def}}{=} d_s\hat{S} + d_a\hat{A} + \sum_{q=1}^{Q} d_q\hat{M}_q \tag{9.3.29}$$

komutira sa svakim simetričnim operatorom $\hat{B}$ u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$.

Čitaocu koji se dobro seća naše diskusije povodom superselekcione opservable celobrojnosti (§ 7.5) sad već mora biti jasno da je opservabla $\hat{D}$ superselekciona opservabla za sistem od N

identičnih čestica, zvaćemo je *superselekciona opservabla maksimalnih simetrija*[9.3.7]. To znači da se prostor stanja $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$ mora ograničiti na jedan od svojstvenih potprostora od $\hat{D}$, tj. na jedan od potprostora maksimalne simetrije. Naime, u smislu K 7.5.1 (i rezimea ispod toga), sistem od N identičnih čestica mora uvek da ima jednu određenu svojstvenu vrednost od $\hat{D}$, i ona ne može nikad da se promeni ni spontanom evolucijom sistema niti merenjem.

Kao što smo napomenuli u § 6.10.1, čestice sa polucelim spinom s nazivaju se *fermioni*, a čestice sa celobrojnim spinom s *bozoni*. A sad možemo da formulišemo poslednji postulat.

VIII POSTULAT O IDENTIČNIM ČESTICAMA

a) Prostor stanja sistema od N identičnih bozona je $\mathcal{V}_s$, prostor svih simetričnih vektora u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$.

b) Prostor stanja sistema od N identičnih fermiona je $\mathcal{V}_a$, prostor svih antisimetričnih vektora u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$.

Kao što vidimo, prostor stanja sistema od N identičnih čestica nije ceo $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$, već samo jedan njegov potprostor maksimalne simetrije. Samo $\mathcal{V}_s$ i $\mathcal{V}_a$ imaju fizičkog smisla i to kao *bozonski* odnosno *fermionski prostor*, kao što ćemo ih zvati.

Ako se setimo sadržaja Postulata o stanjima, onda Postulat o identičnim česticama možemo da formulišemo i na sledeći način: Čisto stanje sistema od N identičnih bozona se nužno opisuje simetričnim vektorom i obratno, svaki N-čestični simetričan vektor u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$ u principu opisuje neko čisto stanje pomenutog sistema. Analogno, čisto stanje sistema od N identičnih fermiona se mora opisivati antisimetričnim vektorom i obratno, proizvoljan N-čestični antisimetrični vektor u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$ u principu opisuje neko čisto stanje pomenutog sistema.

Dakle, Postulat VIII, koji možemo nazvati i *superselekcionim pravilom maksimalne simetrije*, dopunjuje Postulat I za slučaj kvantnog sistema od N identičnih čestica.

9.3.7 Bose-Einstein-ova i Fermi-Dirac-ova statistika

Pošto se mešano stanje $\hat{\rho} = \sum_i w_i \mid \psi_i \rangle\langle \psi_i \mid$ jednog određenog kvantnog sistema može sastojati samo od čistih stanja $\mid \psi_i \rangle$, $i = 1, 2, \ldots$, iz prostora stanja dotičnog sistema, za sistem od N identičnih bozona $\hat{\rho}$ mora biti statistički operator koji deluje u $\mathcal{V}_s$. U ovom širem, statističkom smislu sadržaj Postulata VIII.A poznat je pod nazivom *Bose-Einstein-ove statistike* ("Bose" čitati: Bouz). Dakle, ansambl sistema od kojih svaki sadrži po N identičnih bozona opisuje se Bose-Einstein-ovom statistikom, tj. statističkim operatorom koji deluje u $\mathcal{V}_s$.

Analogno, u širem, statističkom smislu Postulat VIII.B se obično formuliše tako da se ansambl kvantnih sistema od po N identičnih fermiona nužno opisuje tzv. *Fermi-Dirac-ovom statistikom*, a to će reći statističkim operatorom koji deluje u $\mathcal{V}_a$. Napomenimo, radi kompletnosti, da se ansambl sistema sa po N različivih (tj. neidentičnih) čestica opisuje tzv. *Maxwell-Boltzmann-ovom statistikom*, tj. statističkim operatorom koji deluje (u principu) u celom prostoru stanja $\mathcal{H}^{(u)}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(u)}_N$.

[9.3.7] Svojstvene vrednosti od $\hat{D}$ su potpuno nevažne, bitni su svojstveni projektori (ili svojstveni potprostori). Oni su, naravno, ortogonalni i razlažu identični operator u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$: $\hat{S} + \hat{A} + \sum_{q=1}^{Q} \hat{M}_q = \hat{I}$.

Zadatak 9.3.14 Objasniti u čemu je sledeći iskaz pogrešan: Prostor stanja N identičnih bozona i prostor stanja N identičnih fermiona dobijaju se kao potprostori $\mathcal{V}_s$ odnosno $\mathcal{V}_a$ jednog te istog kompozitnog prostora $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$. Relirati objašnjenje sa § 2.6.6.

Zadatak 9.3.15 Po čemu se razlikuju fermionski prostor $\mathcal{V}_a$ sistema od N elektrona i fermionski prostor $\mathcal{V}_a$ sistema od N protona?

9.3.8 Fizički smisao postulata

Videli smo na samom početku ovog odeljka da identične čestice imaju sve inherentne osobine potpuno jednake. Zaključili smo da nijedna opservabla ne može razlikovati ove čestice, tj. da sve opservable moraju biti simetrične. Izgleda plauzibilno da i N-čestična *stanja* $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ koja sa mogu ostvariti u prirodi *ne razlikuju* identične čestice, tj. da svih N čestica igra jednaku ulogu u $|\,\psi\,\rangle$. Ova kvalitativna misao se može precizno izraziti tako da nijedna permutacija $\hat{P}$ ne sme da menja pravac koji definiše $|\,\psi\,\rangle$ (setimo se da je skup pravaca $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ pravi skup stanja u kvantnoj mehanici).

Dovoljno je razmatrati transpozicije (jer množenjem transpozicija dobijamo sve permutacije). Svaki operator transpozicije $\hat{P}_{ij}$ je unitarni operator i involucija, dakle i opservabla i to sa svojstvenim vrednostima ± 1. Pokazali smo u lemi L 7.5.1 da $\hat{P}_{ij}$ neće menjati pravac od $|\,\psi\,\rangle$ samo ako je $|\,\psi\,\rangle$ svojstveni vektor od $\hat{P}_{ij}$. Prema tome nužno

$$\hat{P}_{ij}\,|\,\psi\,\rangle = \pm\,|\,\psi\,\rangle,\ \forall \hat{P}_{ij}. \tag{9.3.30}$$

Znači, u skupu stanja koja su dostupna sistemu od N identičnih čestica operatori svih transpozicija, a prema tome i operatori svih permutacija, svode se na brojeve, tj. imamo jednodimenzionalnu reprezentaciju simetrične grupe S_N. U teoriji reprezentacija ove grupe poznato je da su jedine jednodimenzionalne reprezentacije od S_N identična reprezentacija ($p \to +1,\ \forall p \in S_N$) i alternativna raprezentacija ($p \to (-1)^p,\ \forall p \in S_N$). Dakle, ovim rezonovanjem zaključujemo da se u $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ moramo ograničiti na $\mathcal{V}_s$ ili na $\mathcal{V}_a$.

Da *rezimiramo* našu argumentaciju plauzibilnosti. Prirodno je da opservable ne smeju da razlikuju nerazličive čestice, tj. moraju biti simetrične. To sa svoje strane ima za posledicu da postoji superselekciona opservabla maksimalne simetrije $\hat{D} \stackrel{\text{def}}{=} d_s\hat{S} + d_a\hat{A} + \sum_{q=1}^{Q} d_q\hat{M}_q$, ili ekvivalantno, da se $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ mora zameniti nekim od potprostora maksimalne simetrije: $\mathcal{V}_s = R(\hat{S})$ ili sa $\mathcal{V}_a = R(\hat{A})$ ili sa $R(\hat{M}_q)$, $q = 1, \ldots, Q$. Da otpadaju svi $R(\hat{M}_q)$, a ostaju samo $\mathcal{V}_s$ i $\mathcal{V}_a$ sledi iz toga što i stanja sistema ne smeju da razlikuju nerazličive čestice.

Za tzv. *vezu između spina i statistike*, tj. za iskaz da baš bozonima odgovara $\mathcal{V}_s$, a fermionima $\mathcal{V}_a$, nema plauzabilnog objašnjenja unutar nerelativističke kvantne mehanike.

9.4 Model nezavisnih čestica i Pauli-jev princip

U ovom odeljku ćemo Postulat o identičnim česticama ugraditi u kvantnomehanički formalizam konstrukcijom osnovnih bazisa u bozonskom i fermionskom prostoru. Definisaćemo model nezavisnih čestica (ili model ljuski), koji predstavlja osnovni model za sve kvantnomehaničke sisteme koji se sastoje od više identičnih fermiona, kao što je atomski omotač, jezgro, elektronski gas u

kristalu itd. U kontekstu ovog modela proučićemo Pauli-jev princip, kao i, u praksi veoma važnu, mogućnost njegovog formalnog narušavanja.

9.4.1 * Bazis u bozonskom prostoru

Postavlja se pitanja kako da na što prostiji i prirodniji način konstruišemo bazis u bozonskom prostoru $\mathcal{V}_s$ polazeći od *proizvoljnog* bazisa $\{|\, n\,\rangle | \forall n\}$ u $\mathcal{H}_1^{(u)}$.

Teorem 9.4.1 *a) Prenesimo bazis* $\{|\, n\,\rangle_1 | \forall n\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ *u ostale jednočestične prostore pomoću izomorfizama* $\hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow 1}$, $j = 2, \ldots, N$. *Za dobijeni vektor* $|\, n\rangle_j \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow 1}\,|\, n\rangle_1 \in \mathcal{H}_j^{(u)}$ *govorićemo da je "isto" stanje kao* $|\, n\,\rangle_1 \in \mathcal{H}_1^{(u)}$, $\forall n$*;*

b) Formirajmo indukovani bazis[9.4.1] $\{|\, n_1\rangle\,|\, n_2\rangle \ldots |\, n_N\rangle | \forall n_i, i = 1, 2, \ldots, N\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$.

c) Izdelimo indukovani bazis u klase bazisnih vektora tako da su u istoj klasi svi vektori koji sadrže (kao faktore) istu kombinaciju (sa ponavljanjem) jednobozonakih stanja.

d) Uzimamo zatim po jedan arbitraran bazisni vektor $|\, n_1\,\rangle\,|\, n_2\,\rangle \ldots |\, n_N\,\rangle$ *iz svake klase i konstruišimo*

$$\boxed{|\, n_1 n_2 \ldots n_N\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} c_{n_1 \ldots n_N} \hat{S}\,|\, n_1\,\rangle\,|\, n_2\,\rangle \ldots |\, n_N\,\rangle = \frac{c_{n_1 \ldots n_N}}{N!} \sum_{p \in S_N} \hat{P}\,|\, n_1 n_2 \ldots n_N\,\rangle}, \tag{9.4.1}$$

gde je $n_1 n_2 \ldots n_N$ *jedna kombinacija (sa ponavljanjem) vrednosti kvantnog broja* n *jednobozonskih stanja,* $c_{n_1 \ldots n_N}$ *je konstanta normiranja, a* $\hat{S}$ *je simetrizator.*

Tako smo u $\mathcal{V}_s$ *dobili* bazis*:*

$$\boxed{\{|\, n_1 n_2 \ldots n_N\,\rangle | \text{ sve različite kombinacije sa ponavljanjem}\}}, \tag{9.4.2}$$

Dokaz: * Pošto su $|\, n_1 \ldots n_N\,\rangle$ likovi po $\hat{S}$, očigledno je da pripadaju oblasti likova od $\hat{S}$, tj. da su u $\mathcal{V}_s$. Ako se (9.4.1) posmatra kao razlaganje vektora $|\, n_1 \ldots n_N\,\rangle$ po indukovanom bazisu iz b), onda je zbog pozitivnosti svih razvojnih koeficije nata očigledno da je svaki vektor $|\, n_1 \ldots n_N\,\rangle$ nejednak nuli. Dokažimo ortogonalnost: $\langle\, n_1 \ldots n_N \mid n_1' \ldots n_N'\rangle = \frac{1}{N!} c_{n_1 \ldots n_N} n_{n_1' \ldots n_N'} \sum_{p \in S_N} \langle n_1 \mid \ldots \langle n_N \mid \hat{P} \mid n_1'\,\rangle \ldots \mid n_N'\,\rangle$ (iskoristili smo $\hat{S}^2 = \hat{S}$) $\sim \sum_{p \in s_N} \langle\, n_1 \mid n_1'' \stackrel{\text{def}}{=} n'_{p_1^{-1}}\rangle \ldots \langle\, n_N \mid n_N'' \stackrel{\text{def}}{=} n'_{p_N^{-1}}\rangle$ (ovde $\sim$ znači: jednako s tačnošću do faktora; iskoristili smo (9.3.17). Dalje, "$n_i'' \stackrel{\text{def}}{=} n_{p_i^{-1}}$" znači: indeksu $i (i = 1, \ldots, N)$ pridružimo indeks $p_i^{-1} (p_i^{-1} 1, \ldots, N)$, a onda vrednost kvantnog broja "$n'_{p_i^{-1}}$" (tj. u faktor-vektoru $|\, n'_{p_i^{-1}}\,\rangle$ uzmemo za vrednost kvantnog broja n_i''. Pošto imamo po pretpostavci dve različite kombinacije, za svaku permutaciju bar u jednom jednočestičnom skalarnom proizvodu $\langle\, n_i \mid n_i'' \stackrel{\text{def}}{=} n'_{p_i^{-1}}\rangle$ srešće se nejednaka, i stoga ortogonalna, jednovcestična stanja, i zato i skalarni proizvod u kompozitnom prostoru $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ mora biti nula u svakom sabirku.

Pokažimo sad da bi dva indukovana bazisna vektora $|\, n_1\,\rangle \ldots |\, n_N\,\rangle$ i $|\, n_1'\,\rangle \ldots |\, n_N'\,\rangle$ iz iste klase (videti d)) dale isti bazisni vektor u $\mathcal{V}_s$. Pošto oba vektora sadrže istu kombinaciju jednobozonskih stanja, možemo pisati $|\, n_1'\,\rangle \ldots |\, n_N'\,\rangle = \hat{P}_0\,|\, n_1\,\rangle \ldots |\, n_N\,\rangle$, gde je $\hat{P}_0$ neka permutacija. Pošto je $\hat{S}\hat{P}_0 = \frac{1}{N!} \sum_{p \in S_N} \hat{P}\hat{P}_0 = \hat{S}$ (množenje svake grupe jednim njenim elementom reprodukuje tu grupu) i onda tačnost naše tvrdnje odmah sledi

[9.4.1] Kvantni broj n_i je isti kao i kvantni broj n iz a). Indeks i. služi samo isticanju činjenice da n u vek toru $|\, n_i\rangle \in \mathcal{H}_i^{(u)}$, nezavisno od ostalih jednočestičnih vektora prelazi sve vrednosti.

iz konstrukcije (9.4.1).

Preostaje nam samo dokaz kompletnosti konstruisanog bazisa (9.4.2) u $\mathcal{V}_s$. Dokažimo u tu svrhu da se svaki vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{V}_s$ može razviti po (9.4.2). Razvijmo $|\psi\rangle$ po indukovanom bazisu iz b) u celom $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$: $|\psi\rangle = \sum_{n_1} \ldots \sum_{n_N} \alpha_{n_1 \ldots n_N} \mid n_1 \rangle \cdot \mid n_N \rangle$. Zamenimo to na desnoj strani od $|\psi\rangle = \hat{S} \mid \psi \rangle$: $|\psi\rangle = \sum_{n_1} \ldots \sum_{n_N} \alpha_{n_1 \ldots n_N} \hat{S} \mid n_1 \rangle \ldots \mid n_N \rangle = \sum_{n_1 \ldots n_N} \frac{K_{n_1 \ldots n_N} \alpha_{n_1 \ldots n_N}}{c_{n_1 \ldots n_N}} \mid n_1 \ldots n_N \rangle$. Opet smo iskoristili klase iz c); $K_{n_1 \ldots n_N}$ je broj vektora u klasi koja odgovara kombinaciji $n_1 \ldots n_N$. *Q. E. D.*

Zadatak 9.4.1 * Neka je $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ i neka je $|\psi\rangle = \sum_{n_1} \ldots \sum_{n_N} \alpha_{n_1 \ldots n_N} \mid n_1 \rangle \ldots \mid n_N \rangle$ razvoj ovog vektora po indukovanom bazisu iz Teorema T 9.4.1, deo b). Pokazati da je $|\psi\rangle$ *simetričan* vektor ako i samo ako je

$$\alpha_{n_{p_1}, \ldots n_{p_N}} = \alpha_{n_1 \ldots n_N}, \ \forall p \in S_N. \tag{9.4.3a}$$

(Pišemo skraćeno n_{p_i} umesto "$n_i' \stackrel{\text{def}}{=} n_{p_i}$".)

Zadatak 9.4.2 * a) U $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ u indukovanom bazisu iz Teorema T 9.4.1, deo b) $|\psi\rangle$ se reprezentuje brojnom kolonom $(\alpha_{n_1 \ldots n_N})$ kao što sledi iz Z 9.4.1 (ovde slogovi $n_1, \ldots, n_N$ od vrednosti kvantnog broja n prebrojavaju brojeve u "koloni"; u stvari nemamo kolonu, tj. dotični sistem brojeva nije potpuno uređen u niz). Pokazati da reprezentant od $\hat{P}$ u istom bazisu deluje na sledeći način

$$\hat{P}: \quad (\alpha_{n_1 \ldots n_N}) \to (\alpha_{n_{p_1} \ldots n_{p_N}}). \tag{9.4.3b}$$

b) Objasniti kako se upravo rečeno uklapa u opštu šemu prenošenja grupe transformacija iz oblasti nezavisno promenljivih na skup funkcija (šema je data na kraju 9.3.3).

9.4.2 Bazis od Slater-ovih determinati u fermionskom prostoru

Postavimo sad analogni zadatak kao u prethodnom paragrafu, ali ovoga puta za fermione. Polazimo opet od *proizvoljnog* bazisa $\{\mid n \rangle_1 | \forall n\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ i pokušaćemo da od njega dobijemo, na što jednostavniji i prirodniji način, bazis u fermionskom prostoru $\mathcal{V}_a$.

Naravno, opet ćemo pre svega preslikati ovaj bazis u ostale jednofermionske prostore pomoću izomorfizama $\hat{\mathcal{J}}_{j \leftarrow i}$. Dobićemo $\{\mid n \rangle_j \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{J}}_{j \leftarrow 1} \mid n \rangle_1 | \forall n\}$ bazis u $\mathcal{H}_j^{(u)}, j = 2, \ldots, N$. Bazisni vektor $|n\rangle_j \in \mathcal{H}_j^{(u)}$ je "isto" (zapravo izomorfno, tj. fizički ekvivalentno) stanje kao $|n\rangle_1 \in \mathcal{H}_1^{(u)}$.

Sledeći korak će opet biti formiranje indukovanog bazisa

$$\{\mid n_1 \rangle \mid n_2 \rangle \ldots \mid n_N \rangle | \forall n_i, i = 1, 2, \ldots, N\} \tag{9.4.4}$$

u $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$. (Indeks na kvantnom broju nam omogućuje nezavisno variranje vrednosti.)

U narednom koraku, u analogiji sa (9.4.1), treba da projektujemo vektore iz (9.4.4) u $\mathcal{V}_a$. Međutim, ovde nas čeka jedno iznenađenje, jedna specifičnost sistema od N identičnih fermiona.

Lema 9.4.1 *Ako se u bazisnom vektoru* $\mid n_1 \rangle \mid n_2 \rangle \ldots \mid n_N \rangle$ *iz (9.4.4) bar jedno jednofermionsko stanje* ponavlja, *onda je*

$$\hat{A} \mid n_1 \rangle \mid n_2 \rangle \ldots \mid n_N \rangle = 0. \tag{9.4.5}$$

Dokaz: Dakle, po pretpostavci, u $\mid n_1 \rangle \mid n_2 \rangle \ldots \mid n_N \rangle$ imamo bar jedno ponavljanje istog stanja. Prepišimo, na osnovu toga, ovaj vektor u vidu $\ldots \mid n_i \rangle \ldots \mid n_j \rangle \ldots$, pri čemu su $\mid n_i \rangle$ i $\mid n_j \rangle$ ista stanja (tj. $n_i = n_j$). Očigledno

$$\ldots \mid n_i \rangle \ldots \mid n_j \rangle \ldots = \hat{P}_{ij} \ldots \mid n_i \rangle \ldots \mid n_j \rangle \ldots, \tag{9.4.6}$$

gde je $\hat{P}_{ij}$ transpozicija stanja i-te i j-te čestice. Izračunajmo

$$\hat{A}\hat{P}_{ij} = \frac{1}{N!}\sum_{p\in S_N}(-1)^p\hat{P}\hat{P}_{ij} = -\frac{1}{N!}\sum_{p'\in S_N}(-1)^{p'}\hat{P}' = -\hat{A},$$

gde je $\hat{P}' \stackrel{\text{def}}{=} \hat{P}\hat{P}_{ij}$ i $(-1)^{p'} = -(-1)^p$ (permutacija $p' \stackrel{\text{def}}{=} pp_{ij}$ ima jednu transpoziciju više nego p, znači, suprotnu parnost broja transpozicija). Opet smo iskoristili činjenicu da množenje svih elemenata grupe jednim njenim elementom daje tačno istu grupu (naravno, redosled elemenata se permutuje, ali to u zbiru nije važno).
Iz dokazane operatorske relacije $\hat{A}\hat{P}_{ij} = -\hat{A}$ i (9.4.6) sad sledi: $\hat{A}\ldots|\,n_i\rangle\ldots|\,n_j\rangle\ldots = \hat{A}\hat{P}_{ij}\ldots|\,n_i\rangle\ldots|\,n_j\rangle\ldots = -\hat{A}\ldots|\,n_i\,\rangle\ldots|\,n_j\,\rangle\ldots = 0$ (kako među brojevima tako i među vektorima samo je nulti vektor jednak svom negativnom). *Q. E. D.*

Sad možemo da nastavimo konstrukciju bazisa u $\mathcal{V}_a$ iz unapred datog bazisa u prostoru prvog fermiona.

Teorem 9.4.2 *Ograničivši se na vektore bazisa (9.4.4) koji sadrže kombinaciju jednočestičnih stanja* bez ponavljanja, *svrstajmo ih opet u klase tako da su u istoj klasi svi oni koji sadrže istu kombinaciju. Pretpostavljamo da su sve vrednosti kvantnog broja n* potpuno uređene[9.4.2] *(na arbitreran ali fiksiran način): na primer, $1 < 2 < 3 < \ldots$ Stoga se u svakoj pomenutoj klasi bazisnih vektora iz (9.4.4) nalazi tačno jedan vektor (kanonični, kao što se kaže) u kome sukcesija stanja nije nigde narušena: $n_1 < n_2 < \ldots < n_N$. Ovaj vektor uzmemo za daljnu konstrukciju:*

$$\boxed{|\,n_1 < n_2 < \ldots < n_N\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{N!}\hat{A}\,|\,n_1\,\rangle\,|\,n_2\,\rangle\ldots|\,n_N\,\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{N!}}\sum_{p\in S_N}(-1)^p\hat{P}\,|\,n_1\,\rangle\,|\,n_2\,\rangle\ldots|\,n_N\,\rangle}. \tag{9.4.7}$$

Skup vektora

$$\boxed{\{|\,n_1 < n_2 < \ldots < n_N\,\rangle|\ \textit{sve kombinacije bez ponavljanja}\}} \tag{9.4.8}$$

je bazis u $\mathcal{V}_a$.

Dokaz: * Čitalac se lako može uveriti da se svaka pomenuta klasa bazisnih vektora iz (9.4.4) (sa N različitih jednočestičnih stanja u takvom vektoru) sastoji od $N!$ N-čestičnih vektora i to pored kanoničnog $|\,n_1\rangle\,|\,n_2\rangle\ldots|\,n_N\rangle$ (sa $n_1 < n_2 < \ldots < n_N$) tu su i sve netrivijalne permutacije, tj. $\hat{P}\,|\,n_1\,\rangle\,|\,n_2\,\rangle\ldots|\,n_N\,\rangle$ (u svima njima sa bar negde narušava pomenuta sukcesivnost stanja).
Kao u dokazu L 9.4.1, lako se možemo uveriti[9.4.3] da važi $\hat{A}\hat{P} = (-1)^p\hat{A}$, $\forall p \in S_N$. Stoga bi ostali vektori iz iste klase dali $(-1)^p\,|\,n_l < \ldots < n_N\,\rangle$, kao što se vidi iz (9.4.7). Zato se i ne koristimo ostalim vektorima u klasi. A i potpuna uređenost vektora u polaznom bazisu $\{|\,n\,\rangle|\forall n\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ (koja inače nije uobičajena) je potrebna upravo radi toga da bi krajnji bazisni vektor $|\,n_1 < \ldots < n_N\,\rangle \in \mathcal{V}_a$ bio potpuno određen (a ne neodređen za predznak kao što bi bio slučaj da uzimamo proizvoljnog predstavnika iz klase kao u slučaju bozona).
Očigledno je da (9.4.7) daje vektore $|\,n_1 < \ldots < n_N\,\rangle$ koji spadaju u $\mathcal{V}_a$ (oblast likova projektora $\hat{A}$), i koji su svi različiti od nule. Ortonormiranost skupa (9.4.8) sledi iz: $\langle\,n_1 < \ldots < n_N\,|\,n_1' < \ldots < n_N'\rangle = \langle n_1\,|\ldots\langle n_N\,|\,\hat{A}\,|\,n_1'\,\rangle\ldots|\,n_N'\,\rangle$ (pošto $\hat{A}^2 = \hat{A}$) $= \sum_{p\in S_N}(-1)^p\langle\,n_1\,|\,n_1'' \stackrel{\text{def}}{=} n'_{p_1^{-1}}\rangle\ldots\langle\,n_N\,|\,n_N'' \stackrel{\text{def}}{=} n'_{p_N^{-1}}\rangle$. Sad se u svakom sabirku množe skalarni proizvodi iz pojedinih jadnočestičnih stanja. Ako se radi o dva različita vektora iz (9.4.8),

[9.4.2] Skupovi u kojima je za neke parove elemenata definisana binarna relacija parcijalaog uređenja $\leq$ (analogno kao u "manje ili jednako" za realne brojeva) nazivaju se parcijalno uređeni skupovi. U teoriji parcijalno uređenih skupova definiše se pojam potpuno uređenog skupa. U takvom skupu za svaka dva elementa važi $\leq$ ili $\geq$ ($\leq$ i istovremeno $\neq$ znači $<$).

[9.4.3] Koristimo se činjenicom da važi $(-1)^{pp'} = (-1)^p(-1)^{p'}$, tj. homomorfnošću preslikavanja $p \to (-1)^p$ grupe S_N na multiplikativnu grupu $\{1, -1\}$ (alternirajuća reprezentacija).

onda su $n_1 < \ldots < n_N$ i $n'_1 < \ldots < n'_N$ dve različte kombinacije. Znači, onda postoji bar jedno stanje među stanjima $|\, n_1 \rangle, |\, n_2 \rangle, \ldots, |\, n_N \rangle$ koje ne postoji među stanjima $|\, n'_1 \rangle, |\, n'_2 \rangle, \ldots, |\, n'_N \rangle$ i stoga odgovarajući jednočestični skalarni proizvod je nula u svakom sabirku. Tako se vidi ortogonalnost.
Kada je $n'_1 = n_1,\ n'_2 = n_2, \ldots, n'_N = n_N$, onda će svaka netrivijalna permutacija sastaviti bar u jednom jednočsestičnom skalarnom proizvodu nejednake (tj. ortogonalne) $|\, n_i \rangle$ i $|\, n''_i \stackrel{\mathrm{def}}{=} n'_{p_i^{-1}} \rangle$, tako da u gornjem izrazu svi sabirci moraju dati nulu osim članova sa $\hat{P} = \hat{I}$, koji daje 1. Tako se vidi da je vektor $|\, n_1 < \ldots < n_N \rangle$ normiran.
Još treba da dokažemo kompletnost konstruisanog ortonormiranog skupa, vektora (9.4.8) u $\mathcal{V}_a$. Proizvoljni vektor $|\, \psi \rangle$ sigurno se može razviti po bazisu (9.4.4):

$$|\, \psi \rangle = \sum_{n_1} \ldots \sum_{n_N} \alpha_{n_1 \ldots n_N} \,|\, n_1 \rangle \ldots |\, n_2 \rangle. \tag{9.4.9}$$

Zamenimo ovo razvijanje na desnoj strani od $|\, \psi \rangle = \hat{A} \,|\, \psi \rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1,\ldots,n_N} \alpha_{n_1,\ldots,n_N} \hat{A} \,|\, n_1 \rangle \ldots |\, n_N \rangle = \sum_{n_1 < \ldots < n_N} \sum_{p \in S_N} \alpha_{n'_1 \stackrel{\mathrm{def}}{=} n_{p_1^{-1}}, \ldots, n'_N \stackrel{\mathrm{def}}{=} n_{p_N^{-1}}} \hat{A} \,|\, n'_1 \stackrel{\mathrm{def}}{=} n_{p_1^{-1}} \rangle \ldots |\, n'_N \stackrel{\mathrm{def}}{=} n_{p_N^{-1}} \rangle.$$

Suma po permutacijama prebrojava one bazisne vektore iz (9.4.4) koji pripadaju istoj klasi, dok prva suma po različitim kombinacijama bez ponavljanja prebrojava klase koje mogu da daju doprinos različit od nule (uporediti L 9.4.1).
Pošto je $|\, n'_1 \stackrel{\mathrm{def}}{=} n_{p_1^{-1}} \rangle \,|\, n'_2 \stackrel{\mathrm{def}}{=} n_{p_2^{-1}} \rangle \ldots |\, n'_N \stackrel{\mathrm{def}}{=} n_{p_N^{-1}} \rangle = \hat{P} \,|\, n_1 \rangle \,|\, n_2 \rangle \ldots |\, n_N \rangle$, gornje razvijanje vektora $|\, \psi \rangle$ možemo da pišemo u vidu

$$|\, \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{n_1 < \ldots < n_N} \Big(\sum_{p \in S_N} (-1)^p \alpha_{n'_1 \stackrel{\mathrm{def}}{=} n_{p_1^{-1}}, \ldots, n'_N \stackrel{\mathrm{def}}{=} n_{p_N^{-1}}} \Big) \,|\, n_1 < \ldots n_N \rangle. \tag{9.4.10}$$

Q. E. D.

Zadatak 9.4.3 Neka je $|\, \psi \rangle \in \mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ i neka je razvijanje ovog vektora po bazisu (9.4.4). Pokazati da je vektor $|\, \psi \rangle$ *antisimetričan* ako i samo ako je

$$\alpha_{n_{p_1} \ldots n_{p_N}} = (-1)^p \alpha_{n_1 \ldots n_N},\ \forall p \in S_N, \tag{9.4.11}$$

gde je sad na desnoj strani $n_1 \leq n_2 \leq \ldots n_N$, tj. $n_1, n_2, \ldots, n_N$ odgovara kanoničnom bazisnom vektoru u klasi (pri čemu može biti i ponavljanja istih stanja). Pokazati takođe da iz važenja (9.4.11) sledi da su svi razvojni koeficijenti u (9.4.9) koji stoje uz vektore $|\, n_1 \rangle \ldots |\, n_N \rangle$ sa ponavljanjem jednaki nuli.

Zadatak 9.4.4 Pokazati da iz $|\, \psi_1 \rangle \ldots |\, \psi_N \rangle \in \mathcal{V}_a$ sledi $|\, \psi_1 \rangle \ldots |\, \psi_N \rangle = 0$ za proizvoljne vektore $|\, \psi_1 \rangle, \ldots, |\, \psi_N \rangle \in \mathcal{H}_1^{(u)}$. Drugim rečima, samo je nula nekorelisani antisimetrični vektor. (Indikacija: Iskoristiti (9.4.9) i (9.4.11) sa jednom proizvoljnom transpozicijom $p = p_{ij}$).

Bazisni vektori $|\, n_1 < \ldots < n_N \rangle$ se često pišu u vidu tzv. Slater-ovih determinanti (čitati: Slejterovih) i tako ćemo ih odsad i nazivati. Ove determinante glase:

$$\begin{vmatrix} |\, n_1 \rangle_1 & \cdots & |\, n_1 \rangle_N \\ \cdots & \cdots\cdots & \\ |\, n_N \rangle_1 & \cdots & |\, n_N \rangle_N \end{vmatrix} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \det(|\, n_i \rangle_j) = \tag{9.4.12}$$

$$\sum_{p \in S_N} (-1)^p \,|\, n_{p_1} \rangle \ldots |\, n_{p_N} \rangle = \sqrt{N!} \,|\, n_1 < \ldots < n_N \rangle.$$

Ovde su $n_1 < \ldots < n_N$ N fiksiranih različitih vrednosti kvantnog broja n jednočestičnih stanja, a indeks na ketu pokazuje o kojoj se čestici radi (tj. u kom smo jednofermionskom prostoru).

Zadatak 9.4.5 Objasniti zašto (9.4.12) i (9.4.7) daju isto. (Indikacija: Dokazati prvo $(-1)^{p^{-1}} = (-1)^p, \forall p \in S_N$.)

9.4.3 Model nezavisnih čestica

Matematički problem indukovanja bazisa u $\mathcal{V}_a$ polazeći od bazisa u $\mathcal{H}_1^{(u)}$, koji smo rešili u prethodnom paragrafu, od velikog je fizičkog značaja u tzv. *modelu nezavisnih čestica* ili (kao što se još kaže) *modelu ljuski* (engleski: *shell model*, čitati: šel modl). To je sistem od N identičnih fermiona čiji hamiltonijan ne sadrži nikakvu interakciju (sve čestice su uzajamno dinamički nezavisne):

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i, \tag{9.4.13}$$

gde je $\hat{h}_i$ definisan u $\mathcal{H}_i^{(u)}$, a zatim kao $\hat{I}_1 \otimes \ldots \otimes \hat{I}_{i-1} \otimes \hat{h}_i \otimes \hat{I}_{i+1} \otimes \ldots \otimes \hat{I}_N$ (mada se piše i dalje samo $\hat{h}_i$) prenet u N-fermionski prostor. Osim toga, svih N fermiona su i *dinamički nerazličivi*. To se ogleda u činjenici da su svi jednočestični hamiltonijani $\hat{h}_i$ uzajamno ekvivalentni, tj. dati jednakom operatorskom funicionalnom zavisnošću od osnovnog skupa opservabli $\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i, \hat{\mathbf{s}}_i$ (koji su sa svoje strane takođe ekvivalentni u odnosu na izomorfizam $\hat{\mathcal{J}}_{i \leftarrow i}$).

Primer modela nezavisnih čestica je hamiltonijan elektronskog omotača atoma, ali bez uzajamne interakcije elektrona:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{Z} (\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i}). \tag{9.4.14}$$

Videćemo u § 10.4.7 da možemo zadržati model nezavisnih čestica, a ipak znatno popraviti hamiltonijan (9.4.14), koji igra ulogu neperturbisanog hamiltonijana, dodavanjem jednog usrednjenog jednočestičnog potencijala $\hat{W}_i$ koji je takođe ista funkcija od $\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i, \hat{\mathbf{s}}_i$ za sve čestice:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{Z} (\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i} + \hat{W}_i). \tag{9.4.15}$$

Po fizičkom smislu $\hat{W}_i$ je usrednjena interakcija.

Vratimo se na opšti vid (9.4.13). Imamo simetričan operator $\hat{H}$ u $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$; prema tome, za $\hat{H}$ je $\mathcal{V}_a$ invarijantan potprostor i $\hat{H}$ se redukuje u $\mathcal{V}_a$. Na osnovu Postulata o identičnim fermionima znamo da je od fizičkog interesa samo ovaj redukovani deo hamiltonijana. (Obratiti pažnju na to da se pojedini sabirci na desnoj strani od (9.4.13) ne redukuju u $\mathcal{V}_a$, tako da jednakost ima smisla samo u natprostoru $\mathcal{H}$ u $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$.)

Postavlja se pitanje kako rešiti svojstveni problem od $\hat{H}$ u $\mathcal{V}_a$. Pretpostavimo da smo rešili svojstveni problem hamiltonijana jednog fermiona $\hat{h}_1$ iz (9.4.13) i, radi jednostavnosti, neka $\hat{h}_1$ ima čisto diskretan spektar $\{\epsilon_0 < \epsilon_1 < \ldots\}$ koji možemo potpuno urediti po veličini energetskih nivoa, tako da postoji najniži nivo — osnovni nivo ϵ_0. (U stvari, matematički to nije nužno, ali u fizičkim primerima je uvek tako.) Neka je višestrukost nivoa ϵ_n jednaka $d_n < \infty$ i neka indeks (ili niz indeksa) λ prebrojava degenerisana svojstvena stanja od $\hat{h}_1$. Drugim rečima, neka potpuna klasifikacija stanja (svojstveni bazis od $\hat{h}_1$) glasi

$$\{| n\lambda \rangle | \lambda = 1, 2, \ldots, d_n; n = 0, 1, 2, \ldots\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}, \tag{9.4.16a}$$

i pri tome važi

$$\hat{h}_1 \mid n\lambda \rangle_1 = \epsilon_n \mid n\lambda \rangle_1, \ \forall \lambda, \forall n. \tag{9.4.16b}$$

Pošto se radi o fermionima, moramo potpuno urediti vektore bazisa (9.4.16a). To ćemo najprirodnije uraditi tako da ne narušimo uređenje nivoa. Stoga (pretpostavljajući da su energetski nivoi i vrednosti od n biunivoko povezani) pišemo za različite n:

$$\epsilon_n < \epsilon_{n'} \Leftrightarrow n < n' \Rightarrow \mid n\lambda \rangle < \mid n'\lambda' \rangle, \forall n \neq n', \lambda, \lambda'; \tag{9.4.17a}$$

za isto n

$$\mid n, \lambda = 1 \rangle < \mid n, \lambda = 2 \rangle < \ldots < \mid n, \lambda = d_n \rangle, \ \forall n. \tag{9.4.17b}$$

Sada imamo jedan primer Slater-ovih determinanti, koje smo u prethodnom paragrafu pisali u vidu $\mid n_1 < n_2 \ldots < n_N \rangle$. Pisaćemo ih konkretnije kao $\mid n_1\lambda_1 < n_2\lambda_2 \ldots < n_N\lambda_N \rangle$ (i $n_i\lambda_i$ je opet jedan konkretan par vrednosti kvantnih brojeva $n\lambda$). Znamo iz teorema T 9.4.2 da je sledeći skup vektora bazis u $\mathcal{V}_a$:

$$\boxed{\{\mid n_1\lambda_1 < n_2\lambda_2 \ldots < n_N\lambda_N \rangle \mid \text{sve kombinacije bez ponavljanja}\}}. \tag{9.4.18}$$

Ovaj bazis ima važan fizički smisao.

Teorem 9.4.3 *Bazis (9.4.18) je potpuna klasifikacija stanja (tj. svojstveni bazis) hamiltonijana $\hat{H}$ datog sa (9.4.13) u $\mathcal{V}_a$. Pri tome svojstveni vektor $\mid n_1\lambda_1 < n_2\lambda_2 \ldots < n_N\lambda_N \rangle$ odgovara svojstvenoj vrednosti (energetskom nivou sistema):*

$$\boxed{E_{n_1 n_2 \ldots n_N} \stackrel{\text{def}}{=} \epsilon_{n_1} + \ldots + \epsilon_{n_N}}. \tag{9.4.19}$$

Dokaz: $\hat{H} \mid n_1\lambda_1 < \ldots < n_N\lambda_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{H}\sum_{p\in S_N}(-1)^p\hat{P} \mid n_1\lambda_1 \rangle \cdots \mid n_N\lambda_N \rangle =$

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{p\in S_N}(-1)^p\hat{P}\hat{H} \mid n_1\lambda_1 \rangle \cdots \mid n_N\lambda_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{p\in S_N}(-1)^p\hat{P}(\epsilon_{n_1} + \cdots + \epsilon_{n_N}) \mid n_1\lambda_1 \rangle \cdots \mid n_N\lambda_N \rangle =$$

$E_{n_1 \ldots n_N} \mid n_1\lambda_1 < n_2\lambda_2 < \ldots < n_N\lambda_N \rangle$. *Q. E. D.*

Zadatak 9.4.6 Pokazati da energetski nivo $E_{n_1 \ldots n_N}$ sistema u modelu nezavisnih čestica (9.4.13) može da sadrži kao sabirak u (9.4.19) jedan te isti jednočestični energetski nivo ϵ_n najviše d_n puta (d_n je multiplicitet nivoa ϵ_n).

Broj ponavljanja jednočestičnog nivoa ϵ_n u nivou sistema $E_{n_1 \ldots n_N}$ naziva se *popunjenošću* dotičnog jednočestičnog nivoa u pomenutom nivou sistema. Iskaz zadatka Z 9.4.6 može se iskazati i tako da je popunjenost jednočestičnog nivoa ϵ_n u nivou sistema ceo broj iz intervala $[0, d_n]$.

Zadatak 9.4.7 Objasniti svojim rečima kakva je popunjenost jednočestičnih nivoa $\epsilon_0, \epsilon_1, \ldots$ u najnižem, tj. osnovnom nivou sistema.

Zadatak 9.4.8 Zašto je u specijalnom slučaju $d_{n=0} = N$ osnovni nivo sistema jednak $N\epsilon_0$ i zašto je on nedegenerisan?

Zadatak 9.4.9 Pod pretpostavkom da je $N < d_{n=0}$, kako glasi osnovni nivo sistema i kolika mu je degeneracija? (Indikacija: Iskoristiti sledeću formulu iz kombinatorike: broj kombinacija bez ponavljanja reda p od q različitih elemenata ($p \leq q$) iznosi

$$\binom{q}{p} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{q!}{p!(q-p)!} \tag{9.4.20}$$

(leva strana se čita "q nad p").

Zadatak 9.4.10 Pod pretpostavkom da je $d_{n=0} < N < d_{n=0} + d_{n=1}$, kako glasi osnovni nivo sistema i kolika mu je degeneracija?

Kad se za dati nivo sistema $E_{n_1,n_2,\ldots,n_N}$ zadaju popunjenosti svih jednočestičnih nivoa (izostavljajući one čija je popunjenost nula), onda se govori o *konfiguraciji* nivoa sistema. Ako je za dati $E_{n_1,\ldots,n_N}$ popunjenost nivoa ϵ_n maksimalna (tj. jednaka d_n), onda se kaže da je nivo ϵ_n u $E_{n_1,\ldots,n_N}$ popunjen.

Pošto su nivoi sistema degenerisani, odgovarajući svojstveni vektori nisu jednoznačno određeni. Pored vektora iz bazisa (9.4.18) mogući su i drugačiji svojstveni vektori: bilo koja linearna kombinacija (ili red) degenerisanih Slater-ovih determinanti.

Zadatak 9.4.11 Napisati opšti svojstveni vektor od $\hat{H}$ (datog sa (9.4.13) i koji ima čisto diskretni spektar) i to onaj koji odgovara energetskom nivou sistema čija je konfiguracija $\epsilon_{n_1}^{\frac{N}{3}}, \epsilon_{n_2}^{\frac{N}{3}}, \epsilon_{n_3}^{\frac{N}{3}}$, u eksponentu su popunjenosti (naravno, po pretpostavci, N je deljivo sa 3).

Svojstveni potprostori $\mathcal{V}(E_n)$ jednočestičnog hamiltonijana $\hat{h}_1$ nazivaju se *ljuske* (engleski: *shells*) i često se kaže da se pojedine ljuske (a ne ϵ_n) popunjavaju sa po najviše d_n identičnih fermiona (naravno, $d_n = \dim \mathcal{V}(\epsilon_n)\ \forall n$).

9.4.4 Pauli-jev princip

Kao što smo se uverili u Z 9.4.4 na kraju paragrafa § 9.4.2, u fermionskom prostoru $\mathcal{V}_a$, tj. u prostoru stanja N identičnih fermiona, nema nekorelisanih stanja. Fermi-Dirac-ova statistika ima za posledicu jednu *a priori* (tj. kinematičku) korelisanost jednočestičnih stanja bez obzira na vid interakcije ili eventualno nepostojanje interakcije.

U prethodnom paragrafu smo videli da u modelu nezavisnih čestica svojstvena stanja hamiltonijana sistema (koji ne uključuje interakciju) mogu biti Slater-ove determinante. One sadrže *najprostiju korelaciju*, koja mora postojati i u odsustvu interakcije.

Iskaz da u modelu nezavisnih čestica stanje sistema sa minimalnom korelacijom mora da sadrži N *različitih* jednočestičnih stanja poznat je pod nazivom *Pauli-jev princip* ili princip is ključivanja ili Pauli-jev princip isključivanja[9.4.4]. Ovaj princip je Pauli formulisao još 1925. godine, pri razjašnjavanju strukture složenih atoma. Istorijski ovaj princip je preteča našeg Postulata o identičnim česticama. Mi ga dajemo kao korolar, pošto izlažemo deduktivan kurs kvantne mehanike.

Kao što je čitaocu bez sumnje jasno, ograničenje popunjenosti nivoa ϵ_n na najviše d_n je neposredna posledica Pauli-jevog principa.

Zadatak 9.4.12 Vratiti se na tabelu Tb 7.1 i protumačiti pojedine konfiguracije neutralnih atoma koje su navadene u tabeli. Naročito obratiti pažnju na popunjenost ljuski.

9.4.5 Uglovni momenti popunjene podljuske

Sad ćemo dokazati jedan teorem koji je od velike važnosti za model ljuski u atomu ili jezgru (tj. u sistemu sa rotacionom simetrijom).

[9.4.4]Engleski: *the Pauli exclusion principle*, čitati: ekskljužn prinsipl.

Dosad smo imali opšta razmatranja i pisali smo n za potpuni skup jednočestičnih kvantnih brojeva. A sad ćemo se vratiti na konkretni primer elektrona u vodoniku sličnom atomu, te ćemo sa n (n je sad glavni kvantni broj) prebrojavati jednočestične nivoe ili ljuske, a sa nlm_lm_s jednočestična stanja. Stanja sa fiksiranim n i l čine tzv. *podljusku.*

Teorem 9.4.4 (Teorem o popunjenoj podljusci) *Neka je podljuska nl u vodoniku sličnom atomu popunjena, tj. razmatramo sistem od $N = 2(2l+1)$ elektrona koji popunjavaju degenerisana jednočestična stanja (izostavljamo fiksirane nl):*

$$| \, m_l = -l, m_s = -\frac{1}{2} \rangle < | \, m_l = -l+1, m_s = -\frac{1}{2} \rangle < \cdots \tag{9.4.21}$$

$$\cdots | \, m_l = l, m_s = -\frac{1}{2} \rangle < | \, m_l = -l, m_s = +\frac{1}{2} \rangle < \cdots < | \, m_l = l, m_s = \frac{1}{2} \rangle.$$

Tako smo dobili Slater-ovu determinantu od $2(2l+1)$ stanja datih u (9.4.21):

$$| \, m_l = -l, m_s = -\frac{1}{2} \rangle < \cdots < | \, m_l = l, m_s = \frac{1}{2} \rangle \in \mathcal{V}_a.$$

U ovom N-čestičnom stanju imamo $L = S = J = 0$.

Dokaz: a) $\hat{\mathbf{L}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{l}}_i$, deluje u $\mathcal{H}^{(o)}_{1\ldots N}$ i prenosi se u $\mathcal{V}_a$. Njegov kvadrat možemo da pišemo

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \frac{1}{2}(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+)^2 + \hat{L}_z^2, \tag{9.4.22a}$$

(uporediti (6.2.18)), gde je

$$\hat{L}_\pm \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{N} \hat{l}_{\pm i}. \tag{9.4.22b}$$

Pošto je svaki operator u (9.4.22a) simetričan, svaki od njih komutira sa svakim operatorom permutacije i sa antisimetrizatorom $\hat{A}$. Stoga,

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \mid m_l = -l, m_s = -\frac{1}{2} < \ldots < m_l = l, m_s = \frac{1}{2} \rangle = \tag{9.4.23}$$

$$\sqrt{N!}(\frac{\hat{L}_+\hat{A}\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{A}\hat{L}_+}{2} + \hat{L}_z\hat{A}\hat{L}_z) \mid m_l = -l, m_s = -\frac{1}{2} \rangle \otimes \cdots \otimes \mid m_l = l, m_s = \frac{1}{2} \rangle$$

(iskoristili smo (9.4.22a) i (9.4.7)).
Lako se vidi da $2(2l+1)$-čestični nekorelisani vektor $\mid m_l = -l, m_s = -\frac{1}{2} \rangle \otimes \ldots \otimes \mid m_l = l, m_s = \frac{1}{2} \rangle$ ima ukupan orbitni magnetni kvantni broj $M_l = 0$ (naime, u sabiranju jednočestičnih m_l dva-po-dva se potiru osim $m_l = 0$). Stoga $\hat{L}_z$ daje nulu.
Kada na pomenuti nekorelisani vektor primenimo $\hat{L}_+$, u stvari sa $\hat{l}_{+,i}$ delujemo samo na i-ti jednočestični faktor-vektor i onda sabiramo po i. U svakom sabirku ćemo podići vrednost magnetnog kvantnog broja za jedan. Ali neki drugi faktor-vektor je već bio u stvari jednak novonastalom vektoru (tj. sa istim m_l, a i sa istim m_s), jer su sva jednočestična stanja bila popunjena. Tako dolazi do ponavljanja istog stanja i primena antisimetrizatora $\hat{A}$ posle toga daće nulu. I ovo je slučaj sa $N-1$ sabiraka u $\hat{L}_+$ (tj. za $\hat{l}_{+,i}$ koji zatiču $m_l \neq l$; a $\hat{l}_{+,i} \mid m_l = l \rangle_i = 0$. Stvar je potpuno analogna pri primeni $\hat{L}_-$, samo što se tu radi o snižavanju vrednosti magnetnog kvantnog broja. Dakle, sve skupa, $\hat{\mathbf{L}}^2$ daje nulu.
b) Dokaz da primena $\hat{\mathbf{L}}^2 = \frac{1}{2}(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+)^2 + \hat{S}_z^2$ na našu Slater-ovu determinantu daje nulu je potpuno

analogan sa rezonovanjem pod a).
c) Pošto je $L = S = 0$, a $\hat{\mathbf{J}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, samim tim imamo $J = 0$. *Q. E. D.*

Iz Teorema T 9.4.4 očigledno sledi da *popunjene podljuske elektronskog omotača atoma ne doprinose ukupnim uglovnim momentima L, S i J omotača, već su za ovo merodavni samo valentni elektroni.*

Razumevanje uloge valentnih elektrona u elektronskom omotaču ćemo dalje produbiti u sledećem paragrafu. A sada pokušajmo da damo Pauli-jevom principu smisao koji prevazilazi kontekst modela nezavisnih čestica.

Zadatak 9.4.13 Neka je $|\,\psi_1\,\rangle\,|\,\psi_2\,\rangle \ldots |\,\psi_N\,\rangle$ nekorelisani vektor u kome je i-ta i j-ta čestica u "istom" stanju. Pokazati da je verovatnoća prelaza iz bilo kog stanja $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{V}_a$ u pomenuto nekorelisano stanje jednaka nuli. (Indikacija: Poći od opservable $\hat{P}_{ij}$ ili od $\hat{A}$.) Da li bi verovatnoća prelaza bila nužno nula i da u nekorelisanom vektoru nema ponavljanja jednočestičnog stanja?

Uobičajena formulacija Pauli-jevog principa da dva ili više identičnih fermiona ne mogu biti u istom jednočestičnom stanju može da se razume u smislu verovatnoće prelaza kao u Z 9.4.13 i da se onda odnosi na proizvoljno stanje $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{V}_a$.

9.4.6 Kad možemo da prenebregnemo Pauli-jev princip?

Videli smo da poslednji Postulat ima ozbiljne konsekvence na osobine kvantnomehaničkih sistema i da nam je od neprocenjive vrednosti u proučavanju sistema od više identičnih fermiona. Međutim, novi princip dovodi i do izvesnih pitanja; neka od njih na prvi pogled izgledaju kao paradoksi.

i) Nisu li identični svi elektroni u vasioni (i svi protoni sveta itd)? Pošto je odgovor potvrdan, nije li svaki elektron korelisan sa svima ostalim elektronima u vasioni, tj. ne bi li trebalo da u stvari sve vreme računamo sa antisimetričnim vektorima koji obuhvataju sve elektrone?

ii) Kako možemo u atomskom omotaču posebno da tretiramo valentne elektrone, a popunjene ljuske da odvojimo kao "zamrznuti" *core*? Zar Pauli-jev princip ne povezuje sve elektrone omotača u nerazmrsivu celinu?

Nameće se pomisao da se u izvesnim slučajevima može prenabregnuti korelacija koja potiče od Pauli-jevog principa. Sada ćemo da definišemo takve slučajeve.

a) Fiksirajmo jedno ortogonalno razlaganje prostora prve čestice na dva potprostora

$$\mathcal{H}_1^{(u)} = \mathcal{V}_1^{(I)} \oplus \mathcal{V}_1^{(II)}, \qquad (9.4.24a)$$

i prenesimo ove potprostore (i razlaganje) pomoću izomorfizama $\hat{\mathcal{J}}_{j\leftarrow i}$ i u ostale jednočestične prostore $\mathcal{H}_j^{(u)}$, $j = 2, 3, \ldots, N$:

$$\mathcal{H}_j^{(u)} = \mathcal{V}_j^{(I)} \oplus \mathcal{V}_j^{(II)}. \qquad (9.4.24b)$$

Kada nije bitno o kojem se jednočestičnom prostoru radi, pisaćemo pomenute potprostore u vidu $\mathcal{V}_I$ odnosno $\mathcal{V}_{II}$.

b) Pretpostavimo da se N_1 fermiona "nalazi" u jednočestičom potprostoru $\mathcal{V}_I$, N_2 fermiona u potprostoru $\mathcal{V}_{II}$ ($N_1+N_2=N$), a između ove dve grupe čestica postoji samo korelacija koju uspostavlja Pauli-jev princip. Izraženo preciznim jezikom formalizma, imamo N-fermionski normirani vektor u $\mathcal{V}_a$:

$$\sqrt{\frac{N}{N_1!N_2!}}\hat{A}(|\,\psi_{1\dots N_1}\,\rangle\otimes|\,\chi_{N_1+1\dots N}\,\rangle), \tag{9.4.25a}$$

gde je $\hat{A}$ N-čestični antisimetrizator, $|\,\psi_{1\dots N_1}\,\rangle$ je N_1-čestični normirani antisimetrični vektor takav da je

$$|\,\psi_{1\dots N_1}\,\rangle\in\mathcal{V}_1^{(I)}\otimes\cdots\otimes\mathcal{V}_{N_1}^{(I)}, \tag{9.4.25b}$$

a inače proizvoljan (odsad: fermionsko stanje na $\mathcal{V}_I$), a $|\,\chi_{N_1+1\dots N}\,\rangle$ je N_2-čestični normirani antisimetrični vektor koji pripada potprostoru $\mathcal{V}_{N_1+1}^{(II)}\otimes\mathcal{V}_{N_1+1}^{(II)}\otimes\cdots\otimes\mathcal{V}_N^{(II)}$ a inače je proizvoljan[9.4.5] (odsad: fermionsko stanje na $\mathcal{V}_{II}$).

Razjasnimo, pre svega, šta a) i b) znače u slučaju *svih elektrona sveta*. Podelimo fizički prostor (klasični) na dva domena D_I i D_{II} ($D_I\cup D_{II}=$ sav prostor, $D_I\cap D_{II}=$prazan skup), recimo D_I je zapremina ove zgrade, a D_{II} sav ostali prostor. Definišimo

$$\hat{P}_I\stackrel{\text{def}}{=}\int_{D_I}|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r}\langle\mathbf{r}\,|,\quad \hat{P}_{II}\stackrel{\text{def}}{=}\int_{D_{II}}|\,\mathbf{r}\,\rangle\,\mathrm{d}\mathbf{r}\langle\mathbf{r}\,|, \tag{9.4.26a,b}$$

a oblasti likova ovih projektora u $\mathcal{H}_u$ neka su

$$\mathcal{V}_I\stackrel{\text{def}}{=}R(\hat{P}_I),\quad \mathcal{V}_{II}\stackrel{\text{def}}{=}R(\hat{P}_{II}). \tag{9.4.27a,b}$$

Stanje (9.4.25*b*) onda znači da se svih N_1 elektrona nalaze u domenu D_I, a preostalih N_2 elektrona se nalaze u domenu D_{II}. Da između dve pomenute grupe elektrona postoji samo minimalna korelacija od antisimetrije (videti (9.4.25*a*)) odgovara okolnosti da su N_2 elektrona u D_{II} udaljeni od N_1 elektrona u D_I i ove dve grupe čestica ne interaguju. Nasuprot ovome, unutar domena D_I (kao i unutar D_{II}) može da postoji interakcija i zato vektori $|\,\psi_{1\dots N_1}\,\rangle$ i $|\,\chi_{N_1+1\dots N}\,\rangle$, svaka sa svoje strane mogu da sadrže i druge korelacije.

U drugom primeru, tj. u primeru elektronskog omotača, neka $\mathcal{V}_{II}$ po definiciji obrazuju upravo sva popunjena stanja *core*-a, a $\mathcal{V}_I$ preostala jednočestična stanja (iz svojstvenog bazisa od $\hat{h}_1$ u modelu nezavisnih čestica), koja su na raspolaganju valentnim elektronima. Proučićemo jedan konkretan primer.

[9.4.5] Skiciraćemo izračunavanje faktora normiranja koji je dat u (9.4.25*a*). Grupa S_N svih permutacija N čestica sadrži podgrupu $S_{N_1}\times S_{N_2}$, koja se sastoji od svih permutacija koje permutuju posebno prvih N_1 čestica i posebno N_2 poslednjih, a uopšte ne permutuju između njih. Razlažući S_N na kosete po podgrupi, imamo $S_N=\sum_{p'}(S_{N_1}\times S_{N_2})$, sumiramo po permutacijama koje permutuju prvih N_1 sa poslednjih N_2 čestica, a pripadaju različitim kosetima (uključujemo i identičnu permutaciju). Imamo $\frac{N!}{N_1!N_2!}$ sabiraka (tzv. indeks podgrupe). Pošto je $\hat{A}=(N!)^{-1}\sum_{p\in S_N}(-1)^p\hat{P}$, u $\hat{A}(|\,\psi_{1\dots N_1}\,\rangle\otimes|\,\chi_{N_1+1\dots N}\,\rangle$ ćemo dobiti $N_1!N_2!$ (broj elemenata u kosetu) puta jedan te isti zbir od $\frac{N!}{N_1!N_2!}$ (broj koseta) ortogonalnih vektora (ova ortogonalnost je posledica ortogonalnosti potprostora $\mathcal{V}_I$ i $\mathcal{V}_{II}$). Prema tome, faktor normalizacije c mora da zadovoljava $\frac{c^2N_1!^2N_2!^2}{N!^2}\frac{N!}{N_1!N_2!}=1$, tj. $c=\sqrt{\frac{N!}{N_1!N_2!}}$.

Uzmimo fosfor (P). Iz tabele Tb 7.1 vidimo da je njegova konfiguracija $(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^3$. Ispisujući eksplicitno konfiguraciju neona, *core* fosfora glasi: $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2$. Ovde je i $N_2 = 12$ i $dim\mathcal{V}_{II} = 12$;

$$\mathcal{V}_{II} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{V}(\epsilon_{1s}) \oplus \mathcal{V}(\epsilon_{2s}) \oplus \mathcal{V}(\epsilon_{2p}) \oplus \mathcal{V}(\epsilon_{3s}). \tag{9.4.28}$$

Ovi svojstveni potprostori jednočestičnog hamiltonijana (koji odgovaraju nivoima $\epsilon_{1s}, \ldots, \epsilon_{3s}$) imaju dimenziju 2, odnosno 2, odnosno 6, odnosno 2. Nije teško videti da je 12-elektronski antisimetrični potprostor od prostora $\mathcal{V}_1^{(II)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{V}_{12}^{(II)}$ jednodimenzionalan i da ga obrazuje Slater-ova determinanta definisana pomoću pomenutih 12 jednočestičnih stanja. Ona je sad $|\, \chi_{N_1+1\ldots N} \,\rangle (N_1 = 3)$ u (9.4.25a).

Zadatak 9.4.14 Dokazati što je upravo iskazano.

Kako na primeru fosfora, tako i u svim ostalim atomskim omotačima vektor $|\, \chi_{N_1+1\ldots N} \,\rangle$ u (9.4.25a) je jedinstvena Slater-ova determinanta, koja se može izgraditi na $\mathcal{V}_{II}$.

U stvari, ako bismo i za valentne elektrone imali stanje $|\, \psi_{1\ldots N_1} \,\rangle$ iz (9.4.25a) u vidu Slater-ove determinante, onda bi se (9.4.25a) svelo na formulu komponovanja Slater-ovih determinanti: Kronecker-ov proizvod N_1-čestične i N_2-čestične Slater-ove determinante, zatim primena antisimetrizatora i faktora normiranja i rezultat je $N = (N_1 + N_2)$-čestična Slater-ova determinanta, kao što se lako vidi.

Zadatak 9.4.15 Dokazati ovaj iskaz.

Ali, što se tiče valentnih elektrona, tu se ide dalje od nulte aproksimacije, tj. od modela nezavisnih čestica (u kome se tzv. preostala ili rezidualna interakcija uopšte ne uzima u obzir), tako da $|\, \psi_{1\ldots N_1} \,\rangle$ obično sadrži više od minimalnih korelacija Slater-ove determinante. I samo sprezanje N_1 valentnih elektrona u svojstveno stanje ukupnog uglovnog momenta (što se uvek čini da bi se dobio uglovni moment atoma) daje po pravilu $|\, \psi_{1\ldots N_1} \,\rangle$ koji je antisimetričan, a nije Slater-ova determinanta.

U Dodatku § 9.4.8 dokazaćemo teorem na osnovu kojeg možemo ispustiti iz razmatranja potprostor $\mathcal{V}_{II}$ i N_2 čestica u njemu, tj. možemo N-čestični vektor (9.4.25a) da zamenimo sa N_1-čestičnim vektorom $|\, \psi_{1\ldots N_1} \,\rangle$ (iz istog izraza (9.4.25a)).

Ovaj postupak raspreže N_2 čestica od pomenutih N_1 od njih u pogledu korelacija koje nameće Pauli-jev princip i ispušta iz opisivanja tih N_2 čestica. Cena koja se plaća je odbacivanje i potprostora $\mathcal{V}_{II} \subset \mathcal{H}_u$, tj. ograničavanje jednočestičnog prostora stanja na $\mathcal{V}_I$.

Postupak je egzaktan (tj. nije aproksimacija) ako se sve opservable i transformacije simetrija koje su od interesa redukuju posebno u $\mathcal{V}_1^{(I)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{V}_{N_1}^{(I)}$ i posebno u $\mathcal{V}_{N_1+1}^{(II)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{V}_N^{(II)}$. Inače se moramo služiti približnim opservablama i transformacijama za koje to jeste slučaj, i onda pomenuto prenebregavanje Pauli-jevog principa daje samo približno kvantnomehaničko opisivanje. Strogo uzev, tj. imajući u vidu sve opservable i transformacije (unitarne i antiunitarne operatore) u $\mathcal{V}_a$ od N fermiona, pomenuti postupak predstavlja modelno, približno opisivanje.

9.4.7 Koordinatno-spinska i impulsno-spinska reprezentacija Slater-ovih determinanti

Sva dosadašnja razmatranja bazirana su na apstraktnom jednočestičnom prostoru $\mathcal{H}_1^{(u)} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_1^{(o)} \otimes \mathcal{H}_1^{(s)}$. Proučimo sad *koordinatno-spinsku reprezentaciju* i stoga pređimo na prostor $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1) \otimes \mathbb{C}_1^2$ sa elementima vida $\psi(\mathbf{r}_1, m_{s1})$.

Neka je $\{\phi_n(r_1, m_{s1}) \mid \forall n\}$ bazis u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1) \otimes \mathbb{C}_1^2$. Istim postupkom kao u slučaju apstraktnih prostora, konstruišimo normirane Slater-ove determinante

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{n_1}(\mathbf{r}_1, m_{s1}) & \phi_{n_2}(\mathbf{r}_2, m_{s2}) & \dots & \phi_{n_1}(\mathbf{r}_N, m_{sN}) \\ \phi_{n_2}(\mathbf{r}_1, m_{s1}) & \phi_{n_2}(\mathbf{r}_2, m_{s2}) & \dots & \phi_{n_2}(\mathbf{r}_N, m_{sN}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{n_N}(\mathbf{r}_1, m_{s1}) & \phi_{n_N}(\mathbf{r}_2, m_{s2}) & \dots & \phi_{n_1}(\mathbf{r}_N, m_{sN}) \end{vmatrix} = \tag{9.4.29}$$

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{p \in S_N} (-1)^p \phi_{p_{n_1}}(\mathbf{r}_1, m_{s1}) \phi_{p_{n_2}}(\mathbf{r}_2, m_{s2}) \dots \phi_{p_{n_N}}(\mathbf{r}_N, m_{sN}).$$

Sve Slater-ove determinante (prebrojavamo ih kombinacijama bez ponavljanja $n_1 < \dots < n_N$ vrednosti kvantnog broja n) čine bazis u fermionskom prostoru $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_1) \otimes \mathbb{C}_1^2 \otimes \dots \otimes \mathcal{L}^2(\mathbf{r}_N) \otimes \mathbb{C}_N^2$.

Zadatak 9.4.16 Dokazati da se Slater-ove determinante iz (9.4.29) mogu prepisati u vidu

$$\langle\, \mathbf{r}_1, m_{s1}; \mathbf{r}_2, m_{s2} \dots ; \mathbf{r}_N, m_{sN} \mid n_1 < \dots < n_N \rangle, \tag{9.4.30}$$

gde je $|\, \mathbf{r}_1, m_{s1}; \dots ; \mathbf{r}_N, m_{sN}\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\, \mathbf{r}_1, m_{s1}\,\rangle \otimes \dots \otimes |\, \mathbf{r}_N, m_{sN}\,\rangle$ (uporediti (9.4.7) za desnu stranu).

Kao što se vidi iz oblika (9.4.30) Slater-ovih determinanti u koordinatnoj reprezentaciji, vektor $|\, n_1 < n_2 < \dots < n_N\rangle$ se skalarno množi vektorom $|\, \mathbf{r}_1, m_{s1}; \mathbf{r}_2, m_{s2} \dots ; \mathbf{r}_N, m_{sN}\rangle \in \mathcal{H}_{1\dots N}^{(u)}$, koji ne pripada fermionskom potprostoru $\mathcal{V}_a$. Kao i u modelu nezavisnih čestica, tako i u koordinatnom reprezentovanju apstraktnih Slater-ovih determinanti, koristimo se u stvari natprostorom $\mathcal{H}_{1\dots N}^{(u)}$ fermionskog prostora $\mathcal{V}_a$.

Zadatak 9.4.17 Pokazati da operator koji reprezentuje transpoziciju p_{12} u koordinatno-spinskoj reprezentaciji (pišemo ga opet $\hat{P}_{12}$) ima sledeće delovanje

$$\hat{P}_{12}\psi(\mathbf{r}_1, m_{s1}; \dots \mathbf{r}_N, m_{sN}) = \psi(\mathbf{r}_2, m_{s2}; \dots \mathbf{r}_N, m_{sN}), \tag{9.4.31}$$

i uopštiti ovaj rezultat na operator proizvoljne transpozicije.

Zadatak 9.4.18 * Pokazati da uopštenje transpozicije P_{ij} na proizvoljnu permutaciju daje

$$\hat{P}_{12}\psi(\mathbf{r}_1, m_{s1}; \dots \mathbf{r}_N, m_{sN}) = \psi(\mathbf{r}_{p_1}, m_{sp_1}; \dots \mathbf{r}_N, m_{sN})\ \forall p \in S_N. \tag{9.4.32}$$

Zadatak 9.4.19 Pokazati da je gustina verovatnoće da se u sistemu od N identičnih fermiona dve čestice nalaze na istom mestu i da imaju isti magnetni kvantni broj spina jednaka nuli.

Pošto su talasne funkcije kvantnih sistema obično manje-više neprekidne, iz iskaza Zadatka Z 9.4.19 sledi da bilo koje dve čestice sistema od N identičnih fermiona ne mogu biti mnogo blizu jedna drugoj ako imaju istu projekciju spina. Drugim rečima, kao da se Postulat o identičnim fermionima ispoljava kroz neku *repulziju* čestica (koja je nedinamičkog porekla).

U impulsno-spinskoj reprezentaciji sa $\mathcal{H}_u \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_o \otimes \mathcal{H}_s$ prelazimo na prostor stanja $\mathcal{L}^2(\mathbf{p}) \otimes \mathbb{C}^2$ i sve je potpuno analogno kao u slučaju koordinatno-spinske reprezentacije (u svim gornjim rezultatima treba samo umesto $\mathbf{r}$ da stavimo $\mathbf{p}$).

9.4.8 * Dodatak — zasnivanje prenebregavanja Pauli-jevog principa

Imamo dve vrste antisimetričnih vektora, kao $| \psi_{1\ldots N} \rangle$ (otsad kratko ψ) u (9.4.25a) koji pripadaju fermionskom potprostoru u $\mathcal{V}_1^{(I)} \otimes \cdots \otimes \mathcal{V}_{N_1}^{(I)}$ i vektori kao $| \chi_{N_1+1\ldots,N} \rangle$ (odsad χ) elementi antisimetričnog potprostora u $\mathcal{V}_{N_1+1}^{(II)} \otimes \cdots \otimes \mathcal{V}_N^{(II)}$.

Ako se ograničimo na fermionski prostor definisan na $\mathcal{V}_I$, onda se kvantnomehaničke predikcije mogu u principu svesti na verovatnoće prelaza $v(\psi \to \chi)$. Ali dok je još prisutan i potprostor $\mathcal{V}_{II}$ preko (9.4.25a), moramo pre svega ustanoviti kako treba izračunati pomenute verovatnoće prelaza pomoću N-čestičnih vektora vida (9.4.25a).

Označimo početno N-čestično stanje sa $\phi \stackrel{\mathrm{def}}{=} c\hat{A} \mid \psi \rangle \mid \chi \rangle$, i uvedimo stanje $| \phi_q' \rangle \stackrel{\mathrm{def}}{=} c'\hat{A} \mid \psi' \rangle \mid \chi' \rangle$, gde je $\{| \chi_q' | \forall q \rangle\}$ arbitreran bazis u N_2-čestičnom fermionskom prostoru na $\mathcal{V}_{II}$, $| \psi \rangle$ je arbitreran N_1-čestični fermionski vektor stanja na $\mathcal{V}_I$, a c i c' su konstante normiranja. Tražena verovatnoća prelaza onda glasi:

$$v(\psi \to \psi') = \sum_q |\langle \phi_q' \mid \phi \rangle|^2 \tag{9.4.33}$$

(ovde je prelaz $\psi \to \psi'$ složeni kvantni događaj i moramo ga razložiti na elementarne, čije verovatnoće su sabirci u (9.4.33); videti (2.2.5)). Svrha ovog odeljka je da se pokaže da je desna strana u (9.4.33) jednaka $|\psi \to \psi'|^2$.

Lema 9.4.2 *Neka je $\hat{P}'$ operator permutacije u prostoru stanja $\mathcal{H}_{1\ldots N}^{(u)}$ koji netrivijalno permutuje između N_1 prvih i N_2 po slednjih čestica (kao na primer p' u 9.4.5, samo ovde isključujemo identični operator). Onda kako god odabrali fermionska stanja ψ i ψ' na $\mathcal{V}_I$ i za bilo koja fermionska stanja χ i χ' na $\mathcal{V}_{II}$ imamo*

$$\langle \psi \mid \langle \chi \mid \hat{P}' \mid \psi' \rangle \mid \chi' \rangle = 0. \tag{9.4.34}$$

Dokaz: Fiksirajmo jedan bazis u $\mathcal{V}_I$ i jedan bazis u $\mathcal{V}_{II}$ i indukujmo pomoću njih bazise od Slater-ovih determinanti u fermionskom prostoru na $\mathcal{V}_I$ i u analognom prostoru na $\mathcal{V}_{II}$ (videti Teorem T 9.4.2 i (9.4.7)). Razvijmo sva četiri fermionska stanja $| \psi \rangle, | \psi' \rangle, | \chi \rangle, | \chi' \rangle$ po ovim Slater-ovim determinantama. Primenimo i sve permutacije koje preko antisimetrizatora ulaze u sastav svake Slater-ove determinante (videti (9.4.7)) i sve linearne kombinacije (ili eventualno redove) izvucimo ispred matričnog elementa od $\hat{P}'$ u (9.4.34). Posle svega rečenog, u svakom sabirku se pojavljuje faktor vida (9.4.34), samo što su sad sva četiri vektora $| \psi \rangle, | \psi' \rangle, | \chi \rangle, | \chi' \rangle$ nekorelisana, tj. direktni su proizvodi jednočestičnih stanja (iz $\mathcal{V}_I$ za prva dva pomenuta vektora, a iz $\mathcal{V}_{II}$ za poslednja dva). Posle primene $\hat{P}'$, nekorelisani vektor na mestu $| \psi' \rangle$ sadrži bar jedno jednočestično stanje iz $\mathcal{V}_{II}$! Kad se, posle ove primene izvrši skalarno množenje pojedinih jednočestičnih direktnih faktora, moramo dobiti nulu, jer, kao što smo rekli, bar za jednu od N_1 prvih čestica množimo stanje iz $\mathcal{V}_I$ (bra) sa stanjem iz $\mathcal{V}_{II}$ (ket). *Q. E. D.*

Teorem 9.4.5 *Neka je $| \phi_{1,\ldots,N} \rangle = \sqrt{\frac{N!}{N_1!N_2!}}\hat{A} \mid \psi_{1,\ldots,N_1} \rangle \mid \chi_{N_1+1\ldots N} \rangle$ stanje N identičnih fermiona vida (9.4.25a), gde su $| \psi_{1\ldots N_1} \rangle$ i $| \chi_{N_1+1\ldots N} \rangle$ proizvoljna stanja N_1, odnosno N_2 identičnih fermiona na $\mathcal{V}_I$, odnosno na $\mathcal{V}_{II}$ (uporediti (9.4.24)). Neka je $| \psi_{1\ldots N_1}' \rangle$ drugo proizvoljno stanje*

N_1 identičnih fermiona na $\mathcal{V}_I$. Verovatnoća kvantnog događaja $\mid \psi'_{1\dots N_1}\rangle\langle\psi'_{1\dots N_1}\mid$ u stanju $\mid \phi_{1\dots N}\rangle$ jednaka je verovatnoći prelaza $v(\psi \to \psi')$:

$$|\langle\, \psi'_{1\dots N_1} \mid \psi_{1\dots N_1}\rangle|^2. \tag{9.4.35}$$

dakle, uopšte ne zavisi od stanja $\mid \chi_{N_1+1\dots N}\,\rangle$.

Dokaz: Kao što smo rekli, u N-fermionskom prostoru pomenuti kvantni događaj je složen događaj, te verovatnoća, v, tog događaja glasi (videti (9.4.33)): $v = \sum_q |\langle\, \phi'_q \mid \phi\rangle|^2 = \sum_q (\frac{N!}{N_1!N_2!})^2 |\langle \psi' \mid \langle \chi'_q \mid \hat{A} \mid \psi\,\rangle \mid \chi\,\rangle|^2$ (iskoristili smo $\hat{A}^2 = \hat{A}$), a $\{\mid\ \chi'_q|\forall q\,\rangle\}$ je proizvoljan bazis u N_2-fermionskom prostoru na $\mathcal{V}_{II}$. Pošto se u $\hat{A} = \frac{1}{N!}\sum_{p\in S_N}(-1)^p\hat{P}$ sumira po celoj simetričnoj grupi S_N, pogodno je S_N predstaviti kao sumu (tj. uniju disjunktnih podskupova) po kosetima: $S_N = \sum_{p'} \hat{P}'(S_{N_1} \times S_{N_2})$ (isto kao u 9.4.5, samo sad je reč o operatorima koji reprezentuju permutacije u prostoru $\mathcal{H}^{(u)}_{1\dots N}$). U skladu sa tim možemo da pišemo $\hat{A} = (N!)^{-1}\sum_{p'}(-1)^{p'}\hat{P}'\sum_{p\in S_{N_1}\times S_{N_2}}(-1)^p\hat{P}$. Pošto $(-1)^p\hat{P} \mid \psi\,\rangle \mid \chi\,\rangle = \mid \psi\,\rangle \mid \chi\,\rangle, \forall p \in S_{N_1} \times S_{N_2}, \hat{A} \mid \psi\,\rangle \mid \chi\,\rangle = \frac{N_1!N_2!}{N!}\sum_{p'}(-1)^{p'}\hat{P}' \mid \psi\,\rangle\langle\chi \mid$ ($N_1!N_2!$ je, naravno broj elemenata u svakom kosetu) i na osnovu (L 9.4.2) imamo $v = \sum_q (\frac{N!}{N_1!N_2!})^2 (\frac{N_1!N_2!}{N!})^2 |\langle \psi' \mid \langle\, \chi'_q \mid \psi\rangle \mid \chi\,\rangle|^2$ (pošto među $\hat{P}'$ imamo i $\hat{I}$, jedino na ovaj $\hat{P}'$ se (L 9.4.2) ne odnosi).
Dalje, $v = |\langle\, \psi' \mid \psi\rangle|^2 \sum_q |\langle\, \chi'_q \mid \chi\rangle|^2 = |\langle\, \psi' \mid \psi\rangle|^2 = v(\psi \to \psi')$, jer $\sum_q |\langle\, \chi'_q \mid \chi\rangle|^2 = \langle\chi \mid \sum_q \mid \chi'_q\,\rangle\langle\, \chi'_q \mid \chi\rangle = \langle\chi \mid \hat{I}_{II} \mid \chi\,\rangle = 1$, gde je $\hat{I}_{II}$ identičan operator u N_2-čestičnom fermionskom prostoru na $\mathcal{V}_{II}$. *Q. E. D.*

9.5 Antisimetrizacija orbitno-spinskih koordinata i uglovnih momenata

U ovom odeljku ćemo se vratiti na ideju LS-sprezanja i pretpostavićemo da imamo vektor stanja N identičnih fermiona koji je proizvod orbitnog N-čestičnog vektora i spinskog N-čestičnog vektora. Proučićemo šta u ovom važnom primeru znači antisimetričnost ukupnog N-fermionskog vektora stanja. Relirać̌emo jednim teoremom antisimetričnost sa mogućim kvantnim brojevima dvočestičnog uglovnog momenta i objasnićemo primenu svega toga na dva valentna elektrona u atomskom omotaču.

9.5.1 Razdvajnje prostornih i spinskih varijabli

Da bismo razdvojili sve prostorne varijable sistema N identičnih fermiona od svih njegovih spinskih varijabli, napišimo ukupni N-čestični prostor u LS-sprezanju (uporediti (7.4.14)):

$$\mathcal{H}^{(u)}_{1\dots N} = \mathcal{H}^{(o)}_{1\dots N} \otimes \mathcal{H}^{(s)}_{1\dots N} \tag{9.5.1}$$

$$\mathcal{H}^{(o)}_{1\dots N} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}^{(o)}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(o)}_N, \quad \mathcal{H}^{(s)}_{1\dots N} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}^{(s)}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(s)}_N. \tag{9.5.2a,b}$$

Videli smo da su operatori permutacija $\hat{P}$ u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\dots N}$ entiteti pomoću kojih izražavamo identičnost čestica i njihovu fermionsku ili bozonsku prirodu. Pri faktorizaciji (9.5.1) ukupnog prostora i permutacije se faktorišu:

$$\hat{P} = \hat{P}_o \otimes \hat{P}_s. \tag{9.5.3}$$

To znači da $\hat{P}_o$ deluje u $\mathcal{H}^{(o)}_{1\ldots N}$, tu reprezentuje $p \in S_N$, a $\hat{P}_s$ deluje u $\mathcal{H}^{(s)}_{1\ldots N}$ reprezentujući tu istu permutaciju p. Drugim rečima, $\hat{P}_o$ i $\hat{P}_s$ su "jedna te ista" permutacija, samo što deluju na prostorne odnosno na spinske varijable sistema.

Pretpostavimo da u hamiltonijanu sistema nedostaju članovi koji bi sprezali prostorne i spinske varijable ili da su mali pa ih možemo u dobroj aproksimaciji zanemariti. Onda se ponekad ove dve vrste varijabli ne sprežu (sprezanja stepena slobode je analogon interakcija podsistema materijalne prirode). U formalizmu to znači da je ukupno stanje nekorelisani vektor u odnosu na (9.5.1):

$$\mid \Phi_{1\ldots N}\,\rangle = \mid \psi_{1\ldots N}\,\rangle_o \otimes \mid \phi_{1\ldots N}\,\rangle_s. \tag{9.5.4}$$

Daćemo sad jednostavan i u praksi važan potreban i dovoljan uslov da je stanje $\mid \Phi_{1\ldots N}\,\rangle$ vida (9.5.4) antisimetrično.

Lema 9.5.1 *Da bi vektor $\mid \Phi_{1\ldots N}\,\rangle$ dat u vidu (9.5.4) bio antisimetričan potrebno je i dovoljno da jedan od sledeća dva uslova bude zadovoljen:*

a) vektor $\mid \Psi_{1\ldots N}\,\rangle \in \mathcal{H}^{(o)}_{1\ldots N}$ iz (9.5.4) je simetričan, a vektor $\mid \phi_{1\ldots N}\,\rangle \in \mathcal{H}^{(s)}_{1\ldots N}$ iz (9.5.4) je antisimetričan;

b) $\mid \psi_{1\ldots N}\,\rangle_o$ je antisimetričan, a $\mid \phi_{1\ldots N}\,\rangle_s$ je simetričan.

Dokaz: Dovoljnost odmah sledi kada primenimo $\hat{P} = \hat{P}_o \otimes \hat{P}_s$ na $\mid \Phi_{1\ldots N}\,\rangle$. Naime, na simetrični faktor-vektor će odgovarajući faktor-operator permutacije delovati kao identični operator, a na antisimetrični kao $(-1)^p$. A to je dovoljan uslov da $\mid \Phi_{1\ldots N}\,\rangle$ bude antisimetričan (uporediti (9.3.24)). Potrebnost je nešto teže dokazati. Ona sledi kao posledica dve činjenice: i) da se svaka transpozicija faktorizuje kao u (9.5.3); ii) da je svaka transpozicija (bilo u $\mathcal{H}^{(u)}_{1\ldots N}$, bilo u $\mathcal{H}^{(o)}_{1\ldots N}$, bilo u $\mathcal{H}^{(s)}_{1\ldots N}$) unitaran i involutivan operator, pa prema tome i opservabla. Preporučuje se čitaocu da sam kompletira ovaj dokaz. Radi provere, dokaz je dovršen na kraju Dodatka § 9.5.4. *Q. E. D.*

U ovom paragrafu smo videli kako se nekorelisanost (9.5.4) jednostavno kombinuje sa antisimetričnošću ukupnog vektora. U sledećem paragrafu ćemo ovome još dodati i uglovne momente $\hat{\mathbf{L}}$ i $\hat{\mathbf{S}}$, ali za dovoljno jednostavan slučaj: $N = 2$.

9.5.2 Slaganje dva uglovna momenta i antisimetričnost

Podsetimo se tripletnog i singletnog spinskog dvočestičnog stanja (za dve čestice sa spinom $s = \frac{1}{2}$):

$$\mid 11\,\rangle = \mid \frac{1}{2}\,\rangle \mid \frac{1}{2}\,\rangle,\ \mid 1,-1\,\rangle = \mid -\frac{1}{2}\,\rangle \mid -\frac{1}{2}\,\rangle,\ \mid 10\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mid \frac{1}{2}\,\rangle \mid -\frac{1}{2}\,\rangle + \mid -\frac{1}{2}\,\rangle \mid \frac{1}{2}\,\rangle); \tag{9.5.5}$$

$$\mid 00\,\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(\mid \frac{1}{2}\,\rangle \mid -\frac{1}{2}\,\rangle - \mid -\frac{1}{2}\,\rangle \mid \frac{1}{2}\,\rangle) \tag{9.5.6}$$

(prepisali smo (7.3.2), (7.3.1)). Odmah se vidi da su sva tri tripletna stanja *simetrični* vektori u $\mathcal{H}^{(s)}_{12}$, a da je singletno stanje *antisimetričan* vektor u istom prostoru.

Nameće se pitanje da li je ovo slučajnost ili postoji opštija inherentna povezanost uglovnog momenta i simetrije. Dokazaćemo jedan opšti teorem koji daje odgovor na postavljeno pitanje.

Neka su $\mathcal{H}_1$ i $\mathcal{H}_2$ dva jednočestična prostora stanja identičnih čestica sa vektorskim opservablama uglovnog momenta $\hat{\mathbf{K}}_1$, odnosno $\hat{\mathbf{K}}_2$, definisanim u njima ($\mathcal{H}_1$ je, na primer, ili $\mathcal{H}^{o)}_1$) , ili

$\mathcal{H}_1^{(s)}$, ili $\mathcal{H}_1^{(u)}$). Pretpostavimo da se pri slaganju uglovnih momenata $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$ (definisanom u $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$) pojavljuje *ista vrednost* k kvantnog broja k_1 za $\hat{\mathbf{K}}_1$ i kvantnog broja k_2 za $\hat{\mathbf{K}}_2$, i isti dodatni kvantni brojevi λ uz k. Onda ćemo u kompozitnom prostoru između ostalog dobiti i sledeće multiplete standardnih bazisnih vektora za $\hat{\mathbf{K}}$:

$$| \, k\lambda, k\lambda, 2k-q, m \, \rangle, \tag{9.5.7a}$$

gde kompozitni magnetni kvantni broj m uzima vrednosti

$$m = -(2k-q), -(2k-q)+1, \ldots, (2k-q); \;\; q = 0, 1, 2, \ldots, 2k \tag{9.5.7b}$$

($(2k-q)$ je kvantni broj kompozitnog uglovnog momenta, jer se k i k sprežu u sve vrednosti od $2k$ do $|k-k| = 0$.)

Teorem 9.5.1 *Svaki vektor (9.5.7a) je ili simetričan ili antisimetričan, već prema tome da li je q paran ili neparan broj. Drugim rečima, pregledno prikazano imamo:*
simetrični vektori: $| \, k\lambda, k\lambda, 2k, m \, \rangle, | \, k\lambda, k\lambda, 2k-2, m \, \rangle, \ldots \; \forall m$
antisimetrični vektori: $| \, k\lambda, k\lambda, 2k-1, m \, \rangle, | \, k\lambda, k\lambda, 2k-3, m \, \rangle, \ldots \; \forall m$

Dokaz: Dokaz ovog Teorema je prilično složen (ali ne sadrži nijedan element kojim savesni čitalac ne vlada). Izdvojili smo ga u Dodatku § 9.5.4. *Q. E. D.*

9.5.3 uglovni momenti dva valentna elektrona

Sad ćemo da primenimo rezultate prethodna dva paragrafa na izračunavanje uglovnih momenata neutralnih atoma koji imaju dva valentna elektrona.

Pogledajmo opet Tb 7.1 i uzmimo za prvi primer *berilijum* (Be), koji ima dva valentna elektrona u $2s$ podljusci. Pošto je ovde $l_1 = l_2 = 0, L = 0$ (tzv. S-stanje), imamo dvoelektronsko orbitno stanja koje je, prema Teoremu T 9.5.1, simetrično. Zato kompozitno spinsko stanje mora biti antisimetrično da bi ukupno dvoelektronsko stanje bilo antisimetrično (uporediti Lemu). To onda ne može biti tripletno, nego mora biti singletno stanje (uporediti (9.5.5) i (9.5.6)). Pošto su $L = S = O$, mora biti i $J = 0$. Zato atom Be ima uglovne momente ${}^1S_0$.

Uzmimo za sledeći primer *ugljenik* (C), koji ima dva valentna elektrona u $2p$-stanju. Ovde imamo $l_1 = l_2 = l = 1$, $s_1 = s_2 = s = \frac{1}{2}$. Što se tiče ukupnih dvoelektronskih stanja vida $| \, LM_L \, \rangle \, | \, SM+S \, \rangle$, imamo sladeće mogućnosti na osnovu pravila slaganja uglovnih momenata:

$${}^1D, {}^1P, {}^1S, {}^3D, {}^3P \text{ i } {}^3S. \tag{9.5.8}$$

Zadatak 9.5.1 Prevesti (9.5.8) na jezik vektora $| \, LM_L \, \rangle \, | \, SM+S \, \rangle$.

Postulat o identičnim česticama VIII.B dozvoljava ${}^1D$, ${}^1S$ i ${}^3P$, a zabranjuje ${}^1P$, ${}^3D$ i ${}^3S$.

Zadatak 9.5.2 Dokazati da iz Teorema sledi ovaj iskaz.

Lako je razumeti zašto osnovno stanje atoma ugljenika ima baš ${}^3P$, a ne ${}^1D$ ili ${}^1S$. Naime, ${}^3P$-stanje je antisimetrično u prostornom delu, za razliku od stanja ${}^1D$ i ${}^1S$ koja su simetrična u $\mathcal{H}_{12}^{(o)}$. Pošto se elektroni zbog ove antisimetričnosti "odbijaju" (uporediti pretposlednji pasus od § 9.4.7), za njih je energetski povoljnije (tj. niža je energija) ako imamo antisimetrično prostorno stanje, koje svojom ugrađenom efektivnom repulzijom iziskuje veću uzajamnu udaljenost dva valentna elektrona. Ovo je specijalan slučaj (za dva valentna elektrona) tzv. Hund-ovog pravila, po kome za bilo koji broj valentnih elektrona osnovno stanje ima najveći mogući spin. Ispostavlja se, naime, da tome odgovara prostorno stanje koje je u "najvećoj meri" antisimetrično.

Kao što nam još jedan pogled na podatke o ugljeniku u (Tb 7.1) otkriva, ukupno stanje dva valentna elektrona (a prema tome i celog omotača) ima uglovne momenta ${}^3P_0$, tj. imamo i sveukupni uglovni moment $J = 0$. Pošto je $|\,LSJM_J\lambda\,\rangle = \sum_{M_L,M_S}(LSM_LM_S|JM_J)\,|\,LM_L\lambda\,\rangle\,|\,SM_S\,\rangle$, a simetričnost ili antisimetričnost vektora $|\,LM_L\lambda\,\rangle$ i $|\,SM_S\,\rangle$ je ista bez obzira na konkretnu vrednost M_L, odnosno M_S, svi sabirci u ovom zbiru imaju jednaka svojstva simetrije direktnih faktora. U tom smislu pri prelasku sa nekorelisanog na korelisani vektor u $\mathcal{H}_{12}^{(u)}$ (tj. sa $M_L < M_S$ na JM_J), pripisivanje maksimalne simetrije posebno prostornim i posebno spinskim stepenima slobode je i dalje održivo i korisno.

Postavlja se pitanje zašto je baš $J = 0$, kad su moguća i $J = 1, 2$. Za odgovor je potrebno rešiti svojstveni problem hamiltonijana. Naime, kao što smo videli u (9.1.37), na svaki elektron, zbog toga što ima spin, deluje i spin-orbitno sprezanje $\hat{H}'_s \approx \hat{\mathbf{s}}\cdot\hat{\mathbf{l}}$.

Zbir ovakvih jednočestičnih sabiraka u hamiltonijanu dva valentna elektrona u našem slučaju nije kompatibilan sa $\hat{\mathbf{L}}^2$ i $\hat{\mathbf{S}}^2$, tj. ne favorizuje LS-sprezanje uglovnih momenata, već jj-sprezanje, koje je vida $|\,j_1j_2JM_J\lambda_1\lambda_2\,\rangle = \sum_{m_{j_1},m_{j_2}}(j_1j_2m_{j_1}m_{j+2}|JM_J)\,|\,l_1s_1j_1m_{j_1}\lambda_1\,\rangle\,|\,l_2s_2j_2m_{j_2}\lambda_2\,\rangle$.

S druge strane, ostali sabirci u hamiltonijanu ne favorizuju jj-, već LS-sprezanje. Uzimajući u obzir ceo dvoelektronski hamiltonijan, možemo reći da su kako L i S tako i j_1 i j_2 samo približno dobri kvantni brojevi (pri tome L i S su bolji, zato i pišemo ${}^3P_0$). Dobri kvantni brojevi su J i M_J i oni potiču od ukupnog dejstva svih članova u hamiltonijanu. Stoga i konkretna vrednost $J = 0$ za osnovno stanje proizlazi tek iz dijagonalizacije hamiltonijana.

9.5.4 Dodatak — dokazi teorema i leme

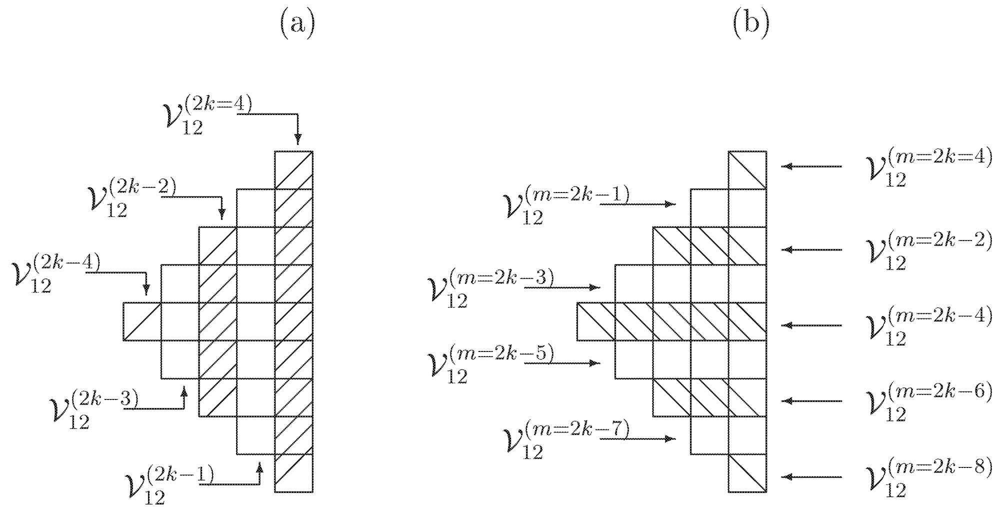
Dokaz Teorema T 9.5.1. Podsetimo se izomorfizma $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow1}$ koji preslikava $\mathcal{H}_1$ na $\mathcal{H}_2$ i koji odgovara pojmu "istih" jednočestičnih stanja. Pretpostavili smo da se radi o istoj vrednosti k kvantnih brojeva k_1 i k_2 i o istom dodatnom kvantnom broju λ u slučaju obeju čestica. To znači da $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow1}$ prevodi ireducibilni invarijantni potprostor $\mathcal{V}_1^{(k\lambda)} \subset \mathcal{H}_1$ na ireducibilni invarijantni potprostor $\mathcal{V}_2^{(k\lambda)} \subset \mathcal{H}_2$ (jer ova dva potprostora sadrže "ista" stanja). Onda se operator izmene $\hat{E}$, koji je usko povezan sa $\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow1}$ (uporediti (9.3.3)), redukuje u $\mathcal{V}_1^{(k\lambda)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k\lambda)}$.

Nakon uvođenja $\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$, imamo dekompoziciju

$$\mathcal{V}_1^{(k\lambda)} \otimes \mathcal{V}_2^{(k\lambda)} = \oplus_{q=0}^{2k}\mathcal{V}_{12}^{(2k-q)} \tag{9.5.9}$$

na ireducibilne invarijantne potprostore za $\hat{\mathbf{K}}$ (uporediti (7.1.11a), samo što sad kompozitni kvantni broj pišemo $2k-q$, a izostavljamo na desnoj strani $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$). Pošto identičnost čestica povlači da se one ne mogu razlikovati ni po jednoj opservabli, to je $\hat{\mathbf{K}}_2 = \hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow1}\hat{\mathbf{K}}_1\hat{\mathcal{J}}_{2\leftarrow1}^{-1}$ ili

$$[\,\hat{\mathbf{K}}, \hat{E}\,] = 0. \tag{9.5.10}$$



Slika 9.3: **Simetrični i antisimetrični potprostori pri slaganju dva uglovna momenta sa** $k=2$**.** *Potprostori* $\mathcal{V}_{12}^{(2k-q)}$ *iz (9.5.9) prikazani su kao kolone poređane tako da vrste predstavljaju svojstvene potprostore kompozitnog magnetnog kvantnog broja* m*:* $\mathcal{V}_{12}^{(m)} \subset \mathcal{H}_{12}$*. Na Crtežu (a) objašnjene su kolone, a na Crtežu (b) dato je razjašnjenje vrsta.*

Zbog kompatibilnosti sa $\hat{\mathbf{K}}, \hat{E}$ se redukuje ne samo u svakom potprostoru $\mathcal{V}_{12}^{(2k-q)}$ iz (9.5.9), što su naši "ormari sa fiokama", (videti crtež C 6.2), već i u svakoj "fioci" $\mathcal{V}_{12}^{(2k-q)}$ i to u svih $2(2k-q)+1$ "fioka" jednako, tj. u ekvivalentne operatore (videti teorem T 6.3.2).

Važna okolnost koja se pojavljuje pri slaganju uglovnih momenata $\hat{\mathbf{K}}_1$ i $\hat{\mathbf{K}}_2$ uz fiksirane $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$) je *nepostojanje višestrukosti* potprostora $\mathcal{V}_{12}^{(2k-q)}$. Drugim rečima, sve su "fioke" $\mathcal{V}_{12}^{(2k-q,m)}$ jednodimenzionalni potprostori. Prema tome, $\hat{E}$ mora u njima da se redukuje u broj i to u svim "fiokama" u isti broj. Pošto je $\hat{E}^2 = \hat{I}$, taj broj može da bude samo ± 1.

Tako smo dokazali:

i) da je svaki vektor (9.5.7a) ili simetričan ili antisimetričan i da su svih $2(2k-q)+1$ vektora multipleta standardnog bazisa za $\hat{\mathbf{K}}$ jedne te iste prirode u pogledu simetrije, tj. ili su svi simetrični ili su svi antisimetrični (nezavisno od vrednosti magnetnog kvantnog broja m).

Potprostor $\mathcal{V}_{12}^{(2k,m=2k)}$ (prva "fioka") je jednodimenzionalan, u njemu imamo samo bazisni vektor

$$\mid k\lambda, k\lambda; 2k, m=2k\,\rangle = \mid k\lambda, m_1 = k\,\rangle \mid k\lambda, m_2 = k\,\rangle, \tag{9.5.11}$$

i on je očigledno simetričan. Na osnovu gornjeg zaključka onda možemo da konstatujemo

ii) da je svaki vektor u $\mathcal{V}_{12}^{m=2k}$ simetričan.

Za dalje rezonovanje poslužimo se Crtežom C 9.3. U potprostoru $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-1)}$ (nešatirana, druga odozgo, vrsta na Crtežu (b)), koji je dvodimenzionalan (dva kvadratića), imamo sledeće bazisne vektore (koji ga obrazuju):

$$\mid m_1 = k\,\rangle \mid m_2 = k-1\,\rangle, \quad \mid m_1 = k-1\,\rangle \mid m_2 = k\,\rangle; \tag{9.5.12}$$

očigledno, od njih možemo da konstruišemo jedan simetričan i jedan antisimetričan vektor:

$$\sqrt{\frac{1}{2}}(|\,k\,\rangle\,|\,k-1\,\rangle+|\,k-1\,\rangle\,|\,k\,\rangle),\quad \sqrt{\frac{1}{2}}(|\,k\,\rangle\,|\,k-1\,\rangle-|\,k-1\,\rangle\,|\,k\,\rangle) \tag{9.5.13}$$

(bitno je da za oba kompozitna vektora u (9.5.12) važi $m_1 \neq m_2$ i da je drugi $\hat{E}$-lik prvog). Geometrijski to znači: iz $[\hat{K}_z, \hat{E}] = 0$ sledi da se $\hat{E}$ redukuje u svakom $\mathcal{V}_{12}^{(m)}$; potprostor $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-1)}$ operator $\hat{E}$ razlaže na jedan simetričan pravac i na jedan antisimetričan pravac.

U potprostoru $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-3)}$ (nešatirana, četvrta odozgo, vrsta na Crtežu (b)) imamo bazis:

$$|\,m_1=k\rangle\,|\,m_2=k-3\rangle, |\,m_1=k-3\rangle\,|\,m_2=k\rangle, |\,m_1=k-1\rangle\,|\,m_2=k-2\rangle, |\,m_1=k-2\rangle\,|\,m_2=k-1\rangle. \tag{9.5.14}$$

Sada sa prva dva i posebno sa druga dva vektora u (9.5.14) možemo preći na po jedan simetričan i po jedan antisimetričan vektor. Tako dobijamo u $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-3)}$ drugi bazis koji sa sastoji od 2 simetrična i od 2 antisimetrična vektora.

Analogno je za $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-5)}$ itd. ako postoje. Možemo izvući sledeći zaključak:

Svaki potprostor $\mathcal{V}_{12}^{(m)}$, $m = 2k - q$, *za neparno* q ima parnu dimenziju, $\dim \mathcal{V}_{12}^{(m)} = q + 1$ i broj simetričnih i broj antisimetričnih vektora u svojstvenom bazisu od $\hat{E}$ u $\mathcal{V}_{12}^{(m)}$ su *jednaki*.

Posmatrajmo sad $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-2)}$ (šatirana, treća odozgo, vrsta na Crtežu (b)). Onda imamo bazis:

$$|\,m_1=k-1\,\rangle\,|\,m_2=k-1\,\rangle \text{ (već simetričan vektor!)}; \tag{9.5.15a}$$

$$|\,m_1=k\,\rangle\,|\,m_2=k-2\,\rangle, |\,m_1=k-2\,\rangle\,|\,m_2=k\,\rangle. \tag{9.5.15b}$$

Dakle, što se tiče svojstvenog bazisa od $\hat{E}$, dobijamo 2 simetrična i jedan antisimetričan vektor. Analogno je u potprostoru $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-4)}$ itd. Formulišimo opšti zaključak.

Svaki potprostor $\mathcal{V}_{12}^{(m)}$, $m = 2k - q$ za *parno* q ima neparnu dimenziju, $\dim \mathcal{V}_{12}^{(m)} = q + 1$ i broj simetričnih vektora je za *jedan veći* od broja antisimetričnih vektora (u svojstvenom bazisu od $\hat{E}$).

Pređimo sad na Crtež (a). Znamo već (videti ii) gore) da je $\mathcal{V}_{12}^{2k}$ (šatirana, prva zdesna, kolona) simetričan prostor. Kakav je sledeći nalevo, $\mathcal{V}_{12}^{(2k-1)}$? Znamo da je određene simetrije (videti i) gore). Ako bi i on bio simetričan, onda bi potprostor $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-1)}$ (druga vrsta, Crtež (b)) morao biti simetričan, jer je sav unutar $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k)} \oplus \mathcal{V}_{12}^{(m=2k-1)}$. A to je u protivurečnosti sa gornjim zaključkom (za q neparno). Dakle, $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-1)}$ je antisimetričan.

Kakav je $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-2)}$? On se seče (u jednom kvadratiću, tj. u jednom pravcu) sa potprostorom $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-2)}$, za koji smo videli da ima 2 simetrična i jedan antisimetričan vektor. Pošto se $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-2)}$ seče u po jednom kvadratiću i sa $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-1)}$ i sa $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k)}$ (na šta otpada jedan antisimetrični odnosno jedan simetrični vektor), pomenuti presek sa $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-2)}$ može samo da bude simetričan pravac. Onda sav $\mathcal{V}_{12}^{(m=2k-2)}$ može biti simetričan. I tako dalje.

Dokaz Leme L 9.5.1. Potrebnost uslova u Lemi. Pojednostavimo obeležavanje i pišimo $|\,\psi\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\,\psi_{1\ldots N}\,\rangle_o, |\,\phi\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\,\phi_{1\ldots N}\,\rangle_s$. Pošto je svaka transpozicija $\hat{P}_{ij}$ (u svakom od tri prostora stanja) unitaran i involutivan operator, ona je i opservabla i može da ima samo ± 1 kao svojstvene vrednosti (i ima obe, jer nije konstanta u celom prostoru).

Pođimo od $\hat{P}_{ij}\,|\,\psi\,\rangle\,|\,\phi\,\rangle = -\,|\,\phi\,\rangle\,|\,\psi\,\rangle$ (što važi za svaku transpoziciju P_{ij} i posledica

je pretpostavljene antisimetričnosti vektora $\mid \psi \rangle \mid \phi \rangle$). Zbog faktorizacije operatora (videti (9.5.3)), imamo

$$(\hat{P}_0^{(ij)} \mid \psi \rangle)(\hat{P}_s^{(ij)} \mid \phi \rangle) = - \mid \psi \rangle \mid \phi \rangle. \tag{9.5.16}$$

Izvršimo razlaganja

$$\mid \psi \rangle = \mid \psi + \rangle + \mid \psi - \rangle, \quad \mid \phi \rangle = \mid \phi + \rangle + \mid \phi - \rangle, \tag{9.5.17a,b}$$

gde je

$$\hat{P}_0^{(ij)} \mid \psi \pm \rangle = \pm \mid \psi \pm \rangle, \quad \hat{P}_0^{(ij)} \mid \phi \pm \rangle = \pm \mid \phi \pm \rangle \tag{9.5.18a,b}$$

(radi se o razlaganju na projekcije u svojstvene potprostore od $\hat{P}_o^{(ij)}$ odnosno $\hat{P}_s^{(ij)}$; ovo razlaganje je, kao što je poznato, jednoznačno). Zamenjujući (9.5.17) i (9.5.18) u (9.5.16), nakon potiranja dva sabirka na levoj strani sa dva sabirka na desnoj strani dolazi se do

$$\mid \psi + \rangle \otimes \mid \phi + \rangle + \mid \psi - \rangle \otimes \mid \phi - \rangle = - \mid \psi + \rangle \otimes \mid \phi + \rangle - \mid \psi - \rangle \otimes \mid \phi - \rangle. \tag{9.5.19}$$

a) Pretpostavimo sad da je $\mid \psi + \rangle \neq 0$. Onda skalarno množenje jednakosti (9.5.19) sa $\langle \psi + \mid$ i deljenje brojem $\langle \psi + \mid \psi + \rangle$ daje $\mid \phi + \rangle = - \mid \phi + \rangle = 0$, a (9.5.17$b$) tada iziskuje $\mid \phi \rangle = \mid \phi - \rangle$. Zamenjujući $\mid \phi + \rangle = 0$ u (9.5.19), množeći skalarno sa $\langle \phi - \mid$ i deleći brojem $\langle \phi - \mid \phi - \rangle$, sledi $\mid \psi - \rangle = - \mid \psi - \rangle = 0$, a (9.5.17$a$) onda daje $\mid \psi \rangle = \mid \psi - \rangle$. Dobili smo varijantu a) uslova u Lemi što se tiče $\hat{P}_{ij}$.

b) Pretpostavimo da je $\mid \phi + \rangle \neq 0$. Analogno sledi $\mid \psi \rangle = \mid \psi - \rangle, \mid \phi \rangle = \mid \phi + \rangle$, tj. varijanta b) uslova u Lemi što se tiče $\hat{P}_{ij}$.

Pošto sa svaka permutacija faktorizuje u transpozicije, vidimo da svaki orbitalni (spinski) permutacioni operator delujući na $\mid \psi \rangle$ (na $\mid \phi \rangle$) daje $+1$ ili -1 ostvarujući tako jednu ireducibilnu reprezentaciju simetrične (tj. permutacione) grupe S_N. Poznato je da postoje samo dve takve reprezentacije i tako sledi uslov Leme.

Glava 10

Približni računi

10.1 Stacionarna perturbacija nedegenerisanog nivoa

Ovaj odeljak posvećen je najprostijem slučaju računa smetnji:

i) kada ni neperturbisani hamiltonijan ni perturbacija ne zavise od vremena,

ii) kada je energetski nivo koji izračunavamo nedegenerisan.

Pokazaćemo da se ovaj specijalni slučaj može primeniti na brojne konkretne probleme zahvaljujući grupi simetrije. I sama teorija i nekoliko primena izloženi su prilično detaljno i to u naizmeničnoj prezentaciji.

U prvom susretu sa osnovnim idejama perturbacione teorije u § 3.4 videli smo da kvantna mehanika nastoji da svoju slabost (nemogućnost egzaktnog računanja) pretvori u prednost (različiti redovi aproksimacije paralelno sa različitim eksperimentalnim rezolucijama daju različite uvide u fiziku pojava). Čitalac će u ovom odeljku videti dalje realizacije ove važne ideje.

10.1.1 Osnovne ideje teorije perturbacije i definicija problema

Kao što smo u izvesnoj meri anticipirali u § 3.4.1, teorija perturbacije stupa na scenu kada ne umemo da rešimo svojstveni problem hamiltonijana kvantnog sistema koji proučavamo, ali zato umemo da rešimo svojstveni problem jednog drugog, ne mnogo različitog, ali jednostavnijeg hamiltonijana. Pod pretpostavkom da je razlika pomenuta dva hamiltonijana mali operator, razvijamo naš hamiltonijan u Taylor-ov red sa drugim (rešenim) hamiltonijanom kao nultom aproksimacijom, a korekcije izračunavamo za prvi, drugi itd. red aproksimacije pomoću pomenutog malog operatora. Sad ćemo ove kvalitativne ideje iskazati preciznim jezikom kvantnomehaničkog formalizma. Hamiltonijan kvantnog sistema koji proučavamo (a koji ne umemo da rešimo egzaktno) obeležavamo sa $\hat{H}$ i nazivamo ga *perturbisanim* hamiltonijanom. Hamiltonijan drugog, jednostavnijeg sistema (koji može biti i fiktivan sistem) označavaćemo sa $\hat{H}_0$ — to će biti *neperturbisani* hamiltonijan. Razliku $\hat{H} - \hat{H}_0$ pisaćemo kao $\hat{H}'$ i nazivaćemo je *perturbacijom.* Dakle,

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'}. \tag{10.1.1}$$

U stvari, radi bolje preglednosti pojedinih redova aproksimacije, (10.1.1) ćemo uopštiti na

$$\hat{H}(a) = \hat{H}_0 + a\hat{H}'. \tag{10.1.2}$$

Za $a = 1$ imamo perturbisani hamiltonijan, za $a = 0$ neperturbisani, a za $a \to +0$ možemo posmatrati kontinualni prelazak (konvergenciju) sa perturbisanog na neperturbisani hamiltonijan. Radićemo sa $\hat{H}(a)$, a na kraju će se ispostaviti da rezultati ne zavise od a (te se odnose i na slučaj $a = 1$).

U ovom odeljku proučavamo *teoriju stacionarnih perturbacija* ili račun smetnji nezavisnih od vremena, što će reći da ni $\hat{H}_0$ ni $\hat{H}'$ ne zavise od vremenske promenljive t.

Pretpostavićemo (radi jednostavnosti) da neperturbisani hamiltonijan ima čisto diskretan spektar, tj. da ima isključivo vezana stanja[10.1.1]:

$$\boxed{\hat{H}_0 \mid n\lambda\,\rangle = E_n^0 \mid n\lambda\,\rangle}, \tag{10.1.3}$$

gde su E_n^0, $n = 0, 1, 2, \ldots$ neperturbisani energetski nivoi, a $\lambda = 1, 2, \ldots, d_n$ je dodatni kvantni broj (ili kvantni brojevi), koji prebrojava bazisne vektore potpune klasifikacije koji odgovaraju jednom te istom (d_n-puta) degenerisanom energetskom nivou[10.1.2] E_n^0. Pretpostavićemo takođe da je kako energetski spektar, tako i pomenuti svojstveni bazis za $\hat{H}_0$ *poznat*.

Naš je cilj da razvijemo $\hat{H}(a)$ u *Taylor-ov red* po a oko $a = 0$ i da izračunamo korekcije na neperturbisane nivoe i stanja u pojedinim redovima približnosti. Pri tome je celishodno koncentrisati pažnju na jedan određen neperturbisani nivo. Označavaćemo ga sa $E_{\overline{n}}^0$. U celom ovom odeljku ograničićemo se na slučaj $d_{\overline{n}} = 1$, tj. na teoriju stacionarne perturbacije *nedegenerisanog* nivoa. Pri tome $E_{\overline{n}}^0$ može biti bilo koji nivo, mada ćemo u primenama najčešće imati $E_{\overline{n}=0}^0$, tj. osnovni nivo.

Neka našem neperturbisanom nivou $E_{\overline{n}}^0$ i odgovarajućem svojstvenom stanju $\mid \overline{n}\,\rangle$ (sad λ nije potrebno) odgovara perturbisani nivo $E_{\overline{n}}$ i svojstveni vektor $\mid E_{\overline{n}}\rangle$ ("odgovaranje" perturbisanog entiteta neperturbisanom je u smislu: prvi teži drugom kad $a \to +0$). Dakle,

$$\hat{H} \mid E_{\overline{n}}\,\rangle = E_{\overline{n}} \mid E_{\overline{n}}\,\rangle. \tag{10.1.4}$$

Taylor-ov red za perturbisani nivo i stanja pisaćemo u vidu

$$E_{\overline{n}} = E_{\overline{n}}^0 + aE^{(1)} + a^2E^{(2)} + \ldots, \tag{10.1.5}$$

$$\mid E_{\overline{n}}\,\rangle = \mid \overline{n}\,\rangle + a \mid 1\,\rangle + a^2 \mid 2\,\rangle + \ldots. \tag{10.1.6}$$

Ovo je definicija za *korekcije* $E^{(p)}$, $\mid p\,\rangle$, $p = 1, 2, \ldots$. Najzad, kad sve zamenimo u (10.1.4), sledi osnovna formula za sve zaključke ovog odeljka:

$$\boxed{(\hat{H}_0 + a\hat{H}')(\mid \overline{n}\,\rangle + a \mid 1\,\rangle + a^2 \mid 2\,\rangle + \ldots) = (E_{\overline{n}}^0 + aE^{(1)} + a^2E^{(2)} + \ldots)(\mid \overline{n}\,\rangle + a \mid 1\,\rangle + a^2 \mid 2\,\rangle + \ldots)}. \tag{10.1.7}$$

[10.1.1] Ako $\hat{H}_0$ sadrži pored diskretnog i kontinualni spektar, samo se sume $\sum_n \sum_\lambda$ zamene odgovarajućim sumama i integralima po ukupnom spektru. Važno je da posmatrani nivo $E_{\overline{n}}^0$ pripada diskretnom spektru od $\hat{H}_0$. (Strogo govoreći, važno je i to da $E_{\overline{n}}^0$ ne bude tačka nagomilavanja drugih nivoa E_n^0, uporediti Lemu L 10.1.1.)

[10.1.2] U preciznijoj notaciji morali bismo pisati λ_n umesto λ (nije isto λ za različite vrednosti od n). Multiplicitet d_n nivoa E_n^0 može biti i $\aleph_0$.

10.1.2 Korekcije prvog reda

Ključna jednakost (10.1.7) u prvom redu približnosti glasi

$$(\hat{H}_0 + a\hat{H}')(\mid \overline{n}\,\rangle + a \mid 1\,\rangle) = (E^0_{\overline{n}} + aE^{(1)})(\mid \overline{n}\,\rangle + a \mid 1\,\rangle); \tag{10.1.8}$$

zapravo, kad se oslobodimo zagrade i ispustimo još preostale članove drugog reda,

$$\hat{H}_0 \mid \overline{n}\,\rangle + a(\hat{H}_0 \mid 1\,\rangle + \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle) = E^0_{\overline{n}} \mid \overline{n}\,\rangle + a(E^{(1)} \mid \overline{n}\,\rangle + E^0_{\overline{n}} \mid 1\,\rangle). \tag{10.1.9}$$

Na osnovu (10.1.3), prvi sabirak na levoj strani je jednak prvom termu na desnoj strani, pa ih možemo izbrisati. Zatim možemo da podelimo sa a. Tako dobijamo

$$\hat{H}_0 \mid 1\,\rangle + \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle = E^{(1)} \mid \overline{n}\,\rangle + E^0_{\overline{n}} \mid 1\,\rangle. \tag{10.1.10}$$

Rešimo (10.1.10) prvo po $E^{(1)}$ tako što ćemo celu jednakost množiti skalarno braom $\langle \overline{n} \mid$:

$$\boxed{E^{(1)} = \langle \overline{n} \mid \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle} \tag{10.1.11}$$

(uzeli smo u obzir da $\langle \overline{n} \mid \hat{H}_0 = \langle \overline{n} \mid E^0_{\overline{n}}$, usled čega je $\langle \overline{n} \mid \hat{H}^0 \mid 1\,\rangle = \langle \overline{n} \mid E^0_{\overline{n}} \mid 1\,\rangle$; takođe je $\langle\, \overline{n} \mid \overline{n}\rangle = 1$). Pređimo sad na rešavanje (10.1.10) po $\mid 1\,\rangle$ i to tako što ćemo $\mid 1\,\rangle$ prethodno razviti po neperturbisanoj potpunoj klasifikaciji stanja:

$$\mid 1\,\rangle = \hat{I} \mid 1\,\rangle = \sum_n \sum_{\lambda=1}^{d_n} \mid n\lambda\,\rangle\langle\, n\lambda \mid 1\rangle, \tag{10.1.12}$$

a zatim zameniti (10.1.12) u (10.1.10). Tako dolazimo do

$$\sum_{n'\lambda'} E^0_{n'} \mid n'\lambda'\,\rangle\langle\, n'\lambda' \mid 1\rangle + \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle = E^{(1)} \mid \overline{n}\,\rangle + E^0_{\overline{n}} \sum_{n'\lambda'} \mid n'\lambda'\,\rangle\langle\, n'\lambda' \mid 1\rangle. \tag{10.1.13}$$

Da bismo (10.1.13) rešili po tekućem razvojnom koeficijentu $\langle\, n\lambda \mid 1\rangle$, pomnožimo (10.1.13) skalarno sa $\langle n\lambda \mid$. Usled ortonormiranosti svojstvenih vektora od $\hat{H}^0$, tako dobijamo

$$E^0_n\langle\, n\lambda \mid 1\rangle + \langle n\lambda \mid \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle = \delta_{n\overline{n}}E^{(1)} + E^0_{\overline{n}}\langle\, n\lambda \mid 1\rangle,\ \forall n,\ \forall \lambda. \tag{10.1.14}$$

U (10.1.14) odmah pada u oči da za $n = \overline{n}$, $\langle\, \overline{n} \mid 1\rangle$ ispada iz jednakosti (dobijamo samo ponovo (10.1.11)). Dakle, iz (10.1.14) $\langle\, \overline{n} \mid 1\rangle$ ne možemo izračunati, a to znači ni iz (10.1.10), jer (10.1.14) je (10.1.10) u reprezentaciji svojstvenog bazisa operatora $\hat{H}_0$.

Ipak, pomenuta poteškoća se može otkloniti. Radi toga uvedimo sledeću konvenciju: perturbisano stanje $\mid E_{\overline{n}}\rangle$ nećemo normirati na jedinicu, već *na jediničnu projekciju*[10.1.3] na odgovarajuće neperturbisano stanje $\mid \overline{n}\,\rangle$:

$$\boxed{\langle\, \overline{n} \mid E_{\overline{n}}\rangle = 1}. \tag{10.1.15}$$

[10.1.3] Premisa za ovu konvenciju je da vektori $\mid E_{\overline{n}}\,\rangle$ i $\mid \overline{n}\,\rangle$ nisu uzajamno ortogonalni. To je u praksi uvek zadovoljeno, jer kad bi bili ortogonalni, to bi bila dva sasvim različita stanja (verovatnoća prelaza iz jednog u drugo bila bi nula!) i onda bi ionako bilo nemoguće razviti $\mid E_{\overline{n}}\,\rangle$ u Taylor-ov red oko $\mid \overline{n}\,\rangle$.

U prvom redu aproksimacije (10.1.15) se (pomoću (10.1.6)) svodi na $1 + a\langle\, \overline{n} \mid 1\rangle = 1$, što povlači

$$\langle\, \overline{n} \mid 1\rangle = 0. \tag{10.1.16}$$

Dakle, korekcija stanja prvog reda $\mid 1\,\rangle$ ima nultu projekciju na neperturbisano stanje $\mid \overline{n}\,\rangle$.

Preostaje nam da iz (10.1.14) izračunamo ostale projekcije od $\mid 1\,\rangle$ (u njima otpada prvi sabirak na desnoj strani):

$$\boxed{\langle\, n\lambda \mid 1\rangle = \frac{\langle n\lambda|\hat{H}'|\overline{n}\,\rangle}{E^0_{\overline{n}} - E^0_n},\ \forall n \neq \overline{n}, \forall\lambda}. \tag{10.1.17}$$

Mada je u (10.1.16) i (10.1.17) korekcija $\mid 1\rangle$ (analogno kao korekcija $E^{(1)}$ u (10.1.11)) svedena na poznate veličine, za teoretičara je uvek izazov da iznađe kompaktniji izraz.

Neka je $\hat{Q}$ projektor na ortokomplement pravca koji obrazuje $\mid \overline{n}\,\rangle$, tj.

$$\hat{Q} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{I} - \mid \overline{n}\,\rangle\langle \overline{n} \mid. \tag{10.1.18}$$

Zadatak 10.1.1 Ispisati jednostavno delovanje operatora $\hat{Q}$ na svojstvene vektore operatora $\hat{H}_0$.

Pomoću $\hat{Q}$ korekcija $\mid 1\,\rangle$ može da se napiše u vidu:

$$\mid 1\,\rangle = \frac{1}{E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0}\hat{Q}\hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle, \tag{10.1.19a}$$

ili preciznije, ako se operatorom na desnoj strani hoće delovati nalevo,

$$\mid 1\,\rangle = \hat{Q}(E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}\hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle \tag{10.1.19b}$$

(množenje skalarno sa $\langle \overline{n} \mid$ pokazuju potrebu za preciznijom formom (10.1.19b), isključivo za prostor ketova dovoljna je forma (10.1.19a)).

Zadatak 10.1.2 Dokazati (10.1.19).

Zadatak 10.1.3 Pokazati da je $(E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)$ singularan operator.

Zadatak 10.1.4 Kako to da u (10.1.19) ipak ima smisla operator $\frac{1}{E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0} \stackrel{\text{def}}{=} (E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)^{-1}$ iako ovaj operator u stvari ne može da se definiše (u celom prostoru našeg kvantnog sistema)?

10.1.3 Energija osnovnog stanja helijumovog atoma

Da bismo ilustrovali kako treba primeniti neke dosadašnje rezultate, prikazaćemo izračunavanje veličine u naslovu paragrafa u prvoj aproksimaciji.

Hamiltonijan neutralnog atomskog omotača helijuma (a to je sad perturbisani hamiltonijan) glasi

$$\hat{H} = \hat{T}_1 - \frac{2e^2}{r_1} + \hat{T}_2 - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}, \tag{10.1.20}$$

gde su $\hat{T}_1$ i $\hat{T}_2$ operatori kinetičke energije prvog odnosno drugog elektrona, a $r_{12} \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Prostor stanja je $\mathcal{L}^2(r_1, \theta_1, \varphi_1) \otimes \mathcal{L}^2(r_2, \theta_2, \varphi_2) \otimes \mathbb{C}^2_1 \otimes \mathbb{C}^2_2$.

Za neperturbisani hamiltonijan pogodno je uzeti (fiktivni) sistem neinteragujućih elektrona

$$\hat{H}_0 \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{T}_1 - \frac{2e^2}{r_1}) + (\hat{T}_2 - \frac{2e^2}{r_2}) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{h}_1 + \hat{h}_2. \tag{10.1.21}$$

Perturbacija je onda

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{r_{12}}. \tag{10.1.22}$$

Treba da ustanovimo kako glasi osnovni nivo $E^0_{\overline{n}=0}$ i osnovno stanje $|\,\overline{n}=0\,\rangle$ za $\hat{H}_0$.

Jednočestični hamiltonijan $\hat{h}_1 = \hat{T}_1 - \frac{2e^2}{r_1}$ je hamiltonijan vodoniku sličnog atoma sa $Z=2$. Mi smo u § 9.1 potpuno rešili diskretni svojstveni problem ovakvog jednoelektronskog hamiltonijana. Imali smo $\epsilon_n = -\frac{1}{n^2}\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}$ (prepisali smo (9.1.23a)) i $\langle\, r,\theta,\varphi \mid nlm\rangle = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$ kao odgovarajući svojstveni vektor (9.1.24a). Najniži nivo ima kvantne brojeve $n=1, l=m_l=0$ (jer $n \doteq 1,2,\ldots;\ l \doteq 0,1,2,\ldots,n-1$). Stavljajući $Z=2$, dolazimo do $\epsilon_{n=1} = -\frac{2me^4}{\hbar^2}$, što iznosi oko $-54,4$eV. Imajući u vidu da $Y^{m=0}_{l=0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ (uporediti (6.6.8)) i da $R_{n=1,l=0}(r) = 2(\frac{Z}{a_0})^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{Zr}{a_0}}$ (videti (9.1.26)), prostorni deo funkcije osnovnog stanja glasi

$$\langle\, r,\theta,\varphi \mid n=1, l=m=0\rangle = \sqrt{\frac{2^3}{a_0^3\pi}}e^{-\frac{2r}{a_0}}. \tag{10.1.23}$$

Uzimajući u obzir spin, vidimo da je pomenuti jednočestični nivo $\epsilon_{n=1}$ multipliciteta 2. U neutralnom He atomu imamo baš 2 elektrona, znači popunjenu podljusku (koja je istovremeno i ljuska).

Na osnovu Teorema o popunjenoj podljusci (T 9.4.4) znamo da omotač ima $L=S=J=0$ i da mu je osnovno stanje Slater-ova determinanta

$$|\,(n=1,l=m_l=0,m_s=-\frac{1}{2}) < (n=1,l=m_l=0,m=\frac{1}{2})\,\rangle.$$

Ali, pošto očigledno imamo LS sprezanje (imamo oštru vrednost za L i S), možemo isti dvoelektronski vektor stanja da pišemo u vidu $|\,L=M_L=0\,\rangle\,|\,S=M_S=0\,\rangle$. Onda odmah vidimo da je prostorni faktor simetričan, a spinski antisimetričan (videti T 9.5.1), tj. imamo

$$\frac{8}{\sqrt{2}\pi a_0^3}e^{-\frac{2}{a_0}(r_1+r_2)}\ (\chi_{\frac{1}{2}}(m_{s1})\chi_{-\frac{1}{2}}(m_{s2}) - \chi_{-\frac{1}{2}}(m_{s1})\chi_{\frac{1}{2}}(m_{s2})) \tag{10.1.24}$$

($\chi_{\pm\frac{1}{2}} \in \mathbb{C}^2$ reprezentuje $|\,\pm\,\rangle \in H_{s=\frac{1}{2}}$ u standardnom bazisu).

Zadatak 10.1.5 a) Kako se u (10.1.24) prepoznaje $|\ L=M_L=0\,\rangle\ |\ S=M_S=0\,\rangle$? b) Pokazati kako se iz (10.1.24) dobija gore pomenuta Slater-ova determinanta.

Uverili smo se da imamo nedegenerisani osnovni nivo $E^0_{\overline{n}=0} = \epsilon_{n=1} + \epsilon_{n=1} \approx -108,8$eV neperturbisanog hamiltonijana $\hat{H}_0$. Izračunajmo sad korekciju prvog reda $E^{(1)}$ ovog nivoa. Prema (10.1.11), treba izračunati očekivanu vrednost perturbacije (10.1.22) u stanju (10.1.24). Dobija se $E^{(1)} \approx 34$eV.

Zadatak 10.1.6 Prodiskutovati predznak od $E^{(1)}$ u ovom primeru i objasniti fizički smisao predznaka.

Na crtežu C 10.1 prikazaćemo teorijski nivo u nultoj i u prvoj aproksimaciji i eksperimentalni nivo ne samo za He, već i za slične sisteme Li^+ i Be^{++}.

Zadatak 10.1.7 Objasniti zašto je u sva tri primera na crtežu C 10.1 $E^0_{\overline{n}=0} < E_{\overline{n}=0}$ (pretpostavljajući da je $E^{\text{teor.}}_{\overline{n}=0} \approx E^{\text{eksper.}}_{\overline{n}=0}$).

Tabela 10.1: **Poredjenje rezultata eksperimenta i računa do prve perturbacione popravke za sisteme He, Li^+ i Be^{++}.**

	He	Li^+	Be^{++}
$E^0_{\overline{n}=0} + E^{(1)}$ (teor.)	-74.8eV	-193eV	-365.5eV
$E^0_{\overline{n}=0}$ (eksper.)	-78.6eV	-197.1eV	-370eV
$E^0_{\overline{n}=0}$ (teor.)	-108.8eV	-243.5eV	-433eV

10.1.4 Korekcija drugog reda za energiju

Da bismo izračunali popravku iz naslova, ispišimo sa leve i desne strane od (10.1.7) članove drugog reda po a, a zatim podelimo sa a^2. Tako dobijamo

$$\hat{H}_0 \mid 2\,\rangle + \hat{H}' \mid 1\,\rangle = E^0_{\overline{n}} \mid 2\,\rangle + E^{(1)} \mid 1\,\rangle + E^{(2)} \mid \overline{n}\,\rangle. \qquad (10.1.25)$$

Da bismo (10.1.25) rešili po $E^{(2)}$, pomnožimo jednakost skalarno sa $\langle \overline{n} \mid$. Znamo da je $\langle\, \overline{n} \mid 1\rangle = 0$ (uporediti (10.1.16)). Ako u (10.1.15) razvijemo $E_{\overline{n}}$ po a (tj. zamenimo (10.1.5)) i uzmemo drugu popravku na levoj strani i na desnoj strani, dolazimo do

$$\langle\, \overline{n} \mid 2\rangle = 0. \qquad (10.1.26)$$

Stoga, iz (10.1.25) sledi

$$E^{(2)} = \langle \overline{n} \mid \hat{H}_0 \mid 2\,\rangle + \langle \overline{n} \mid \hat{H}' \mid 1\,\rangle. \qquad (10.1.27)$$

Pošto $\langle \overline{n} \mid \hat{H}^0 = \langle \overline{n} \mid E^0_{\overline{n}}$, prvi član na desnoj strani otpada usled (10.1.26). Kada u (10.1.27) $\hat{H}' \mid 1\,\rangle$ zamenimo sa $\hat{H}'\hat{I} \mid 1\,\rangle$ i iskoristimo relaciju zatvorenosti za svojstveni bazis od $\hat{H}_0$, onda u (10.1.27) možemo zameniti (10.1.17) i tako doći do

$$E^{(2)} = \sum_{n \neq \overline{n}} \sum_{\lambda} \frac{\langle \overline{n} \mid \hat{H}' \mid n\lambda\,\rangle\langle n\lambda \mid \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle}{E^0_{\overline{n}} - E^0_n}$$

(opet smo koristili $\langle\, \overline{n} \mid 1\rangle = 0$). Kompaktnije, rezultat glasi

$$\boxed{E^{(2)} = \sum\nolimits_{n \neq \overline{n}} \frac{\sum_\lambda |\langle \overline{n} \mid \hat{H}' \mid n\lambda\,\rangle|^2}{E^0_{\overline{n}} - E^0_n}}. \qquad (10.1.28a)$$

Zadatak 10.1.8 Pokazati da se (10.1.28a) može još kompaktnije prepisati u vidu

$$E^{(2)} = \langle \overline{n} \mid \hat{H}'(E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}\hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle \qquad (10.1.28b)$$

(uporediti (10.1.18)).

Zadatak 10.1.9 Pokazati da bez obzira da li u perturbaciji $\hat{H}'$ preovlađuju repulzivne ili atraktivne "sile", ako je $E^0_{\overline{n}}$ osnovni nivo, uvek je

$$\boxed{E^{(2)} \leq 0}, \qquad (10.1.29)$$

tj. uloga druge popravke je da se poveća energija vezivanja ili da se deprimira nivo.

Ako sad ponovo bacimo pogled na Crtež C 10.1, vidimo da iz (10.1.29) proizlazi da će se $E^0_{\overline{n}} + E^{(1)} + E^{(2)}$ približiti eksperimentalnoj vrednosti $E_{\overline{n}}$ za sva tri omotača.

Vratimo se rezultatu (10.1.28*a*). Po pravilu prostor stanja kvantnog sistema je beskonačno dimenzionalan, te se u (10.1.28*a*) pojavljuju redovi. Postavlja se pitanje da li možemo biti sigurni da ti redovi konvergiraju. Izvešćemo jedan dovoljan uslov za konvergenciju i ujedno daćemo jednu ocenu veličine druge popravke $E^{(2)}$.

Lema 10.1.1 *i) Ako neperturbisani nivo $E^0_{\overline{n}}$, nulta aproksimacija od $E_{\overline{n}}$, nije tačka nagomilavanja neperturbisanih nivoa, tj. ako postoji najbliži neperturbisani nivo $E^0_{\tilde{n}} \neq E^0_{\overline{n}}$ i*

b) ako je disperzija perturbacije $\hat{H}'$ u neperturbisanom stanju $|\,\overline{n}\,\rangle$ konačna, tj. ako $\Delta^2 \hat{H}' < \infty$, onda $E^{(2)}$ sigurno postoji i

$$|E^{(2)}| \leq \frac{\Delta^2 \hat{H}'}{|E^0_{\tilde{n}} - E^0_{\overline{n}}|}. \tag{10.1.30}$$

Dokaz: Uzimanjem modula leve strane i desne strane od (10.1.28*a*), sledi $|E^{(2)}| \leq \sum\limits_{n \neq \overline{n}} \sum\limits_{\lambda} \frac{|\langle \overline{n} \mid \hat{H}' \mid n\lambda \rangle|^2}{|E^0_{\overline{n}} - E^0_n|}$ (jer moduo komutira sa limesom, a moduo zbira je manji ili jednak zbiru modula). Ako na desnoj strani zamenimo E^0_n sa vrednošću najbližeg nivoa $E^0_{\tilde{n}}$, time ne možemo smanjiti desnu stranu. Stoga, $|E^{(2)}| \leq \sum_{n \neq \overline{n}} \sum_{\lambda} \frac{|\langle \overline{n} \mid \hat{H}' \mid n\lambda \rangle|^2}{|E^0_{\overline{n}} - E^0_{\tilde{n}}|} = \frac{\sum\limits_{n \neq \overline{n}} \sum\limits_{\lambda} \langle \overline{n} | \hat{H}' | n\lambda \rangle \langle n\lambda | \hat{H}' | \overline{n} \rangle}{|E^0_{\overline{n}} - E^0_{\tilde{n}}|} = \frac{\langle \overline{n} | \hat{H}' (\hat{I} - | \overline{n} \rangle \langle \overline{n} |) \hat{H}' | \overline{n} \rangle}{|E^0_{\overline{n}} - E^0_{\tilde{n}}|} = \frac{\langle \overline{n} | \hat{H}'^2 | \overline{n} \rangle - \langle \overline{n} | \hat{H}' | \overline{n} \rangle^2}{|E^0_{\overline{n}} - E^0_{\tilde{n}}|} = \frac{\Delta^2 \hat{H}'}{|E^0_{\overline{n}} - E^0_{\tilde{n}}|}$ (iskoristili smo opštu relaciju $\Delta^2 \hat{A} = \langle\, \hat{A}^2\, \rangle - \langle\, \hat{A}\, \rangle^2$, uporediti (4.1.2)). *Q. E. D.*

Disperzija $\Delta^2 \hat{H}'$ zavisi samo od $|\,\overline{n}\,\rangle$ (i od $\hat{H}'$), ali ne i od ostalih neperturbisanih stanja $|\,n\lambda\,\rangle$. Ako je $E^0_{\tilde{n}}$ dovoljno udaljen od $E^0_{\overline{n}}$, onda je desna strana od (10.1.30), a prema tome i druga popravka energije, mali broj. Pretpostavljajući da su $E^{(p)}$, $p \geq 3$, još manji (kao što je obično slučaj), onda je prva aproksimacija $E^0_{\overline{n}} + E^{(1)}$ za tačnu energiju sistema $E_{\overline{n}}$ prilično dobra.

10.1.5 Kvadratni Stark-ov efekt dvoatomskog molekula

Da bismo ilustrovali primenu druge popravke energije, izračunaćemo u drugoj aproksimaciji *osnovni nivo dvoatomskog molekula* i to u homogenom električnom polju (tzv. kvadratni Stark-ov efekt). Učinićemo to u modelu tzv. krutog rotatora.

Za izračunavanje osnovnog nivoa najvažniji doprinos daju niskoležeći pobuđeni nivoi molekula (jer onda je imenitelj u (10.1.28*a*) najmanji, te su sabirci najveći). Ispostavlja se da se najlakše ekscituje (dakle najniže leži) tzv. traka rotacionih nivoa ili rotaciona traka[10.1.4].

Ona teorijski sledi iz kinetičke energije sistema, a dominantni doprinos kinetičkoj energiji daju kinetičke energije dva atomska jezgra u molekulu.

Za definisanje neperturbisanog hamiltonijana pogodno je izdvojiti samo najviše relevantne sabirke u hamiltonijanu ili, kao što se kaže, odgovarajući dinamički stepen slobode.

Zanemarićemo elektronske omotače, a dva jezgra posmatraćemo kao dve čestice. Kao što smo videli u § 4.5, sa dve čestice se prelazi na efektivne čestice: centar mase i relativnu česticu. Zanemarićemo centar masa (jer ne daje pobuđenja). Što se tiče relativne čestice (sa masom

[10.1.4] Engleski *rotational band*; čitati: routejšnl bend.

m), uzećemo samo njen operator kinetičke energije. Izrazićemo ga pomoću sfernih polarnih koordinata:

$$\hat{T}_{R\check{C}} = \frac{\hat{\mathbf{l}}}{2mr^2} - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) \qquad (10.1.31)$$

(videti (6.6.17)).

Model krutog rotatora sastoji se u tome da naša dva atoma zamišljamo kao da su ukrućena na stalnom uzajamnom rastojanju $r = r_0$. U kvantno-mehaničkim terminima istu misao iskazujemo tako da u ovom modelu vibraciona pobuđenja uzimamo za beskonačno velika, tj. pretpostavljamo da se ne mogu pobuditi (naime, vibriranje duž r bi dalo odstupanje od $r = r_0$). Ovim modelom u stvari izdvajamo rotacioni dinamički stepen slobode dvoatomskog molekula (uporediti 6.9.6).

Zanemarićemo drugi sabirak na desnoj strani od (10.1.31), a u prvom ćemo staviti $r = r_0$. Tako dobijamo *neperturbisani hamiltonijan*:

$$\hat{H}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2mr_0^2}. \qquad (10.1.32)$$

Kao što znamo iz klasične fizike, izraz mr_0^2 je moment inercije, a fizički sistem čiji hamiltonijan ima vid (10.1.32) se naziva rotatorom. Otud naziv modela koji primenjujemo.

Spoljašnje homogeno električno polje $\mathbf{E}$ će delovati na kruti rotator tako da se vektorski operator električnog dipola molekula $\hat{\mathbf{d}}$ spreže sa spoljašnjim poljem

$$\hat{H}' = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}. \qquad (10.1.33)$$

To je naša *perturbacija*. Pogodno je z-osu usmeriti duž električnog polja $\mathbf{E}$. Onda se (10.1.33) svodi na

$$\hat{H}' = -\hat{d}_z E = -Ed\cos\theta, \qquad (10.1.34)$$

gde je E intenzitet polja, d električni dipolni moment rotatora (koji je konstantan u ovom modelu), a θ je ugao između linije koja prolazi kroz težište ukupne pozitivne i težište ukupne negativne električnosti molekula s jedne strane i z-ose, tj. smera od $\mathbf{E}$, s druge strane. Dakle, perturbisani hamiltonijan našeg kvantnog sistema glasi

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2mr_0^2} - Ed\cos\theta. \qquad (10.1.35)$$

Ceo $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ deluje u uglovnom faktor prostoru $\mathcal{L}^2(\Omega)$ relativne čestice i u modelu krutog rotatora radijalni faktor prostor $\mathcal{L}^2(r)$ odgovara vibracionom dinamičkom stepenu slobode, koji sadrži viša pobuđenja, pa ga ispuštamo iz razmatranja.

Očigledno, energetski nivoi neperturbisanog hamiltonijana su $E_l = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr_0^2}$, $l = 0, 1, 2, \ldots$, a potpuna klasifikacija stanja (u $\mathcal{L}^2(\Omega)$) je $\{\langle\, \theta, \varphi \mid lm_l \rangle \mid m_l = -l, -l+1, \ldots, +l;\ l = 0, 1, 2, \ldots\}$. Osnovni nivo je $E^0_{\overline{n}} = E_{l=0} = 0$ (nema rotacionog pobuđenja) i on je nedegenerisan, a odgovara mu osnovno stanje $\mid l = m = 0\,\rangle = \mid \overline{n}\,\rangle$.

Pre nego što se upustimo u izračunavanje popravki $E^{(1)}$ i $E^{(2)}$, iskoristimo činjenicu da je perturbacija $\hat{H}'$ z-komponenta vektorskog operatora (uporediti (10.1.34)).

Videli smo u (6.6.9) da $Y_{l=1}^{m=0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$. Stoga imamo

$$\langle lm \mid \hat{H}' \mid l'm' \,\rangle = c\int_0^\pi \sin\theta\, \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_1^0(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi),$$

gde je c za nas sad nevažna konstanta. Proizvod funkcija $Y_1^0(\theta,\varphi)Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)$ se pod rotacijama ponaša na sledeći način:

$$\hat{U}(\varphi\mathbf{u})Y_1^0(\theta,\varphi)Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi) = Y_1^0(R_{\varphi\mathbf{u}}^{-1}\theta, R_{\varphi\mathbf{u}}^{-1}\varphi)Y_{l'}^{m'}(R_{\varphi\mathbf{u}}^{-1}\theta, R_{\varphi\mathbf{u}}^{-1}\varphi).$$

Prema tome, $Y_1^0 Y_{l'}^{m'}$ se ponaša kao direktni proizvod.

Ako je $l' > 0$, onda

$$Y_1^0 Y_{l'}^{m'} = c_1 Y_{l'-1}^{m'} + c_2 Y_{l'}^{m'} + c_3 Y_{l'+1}^{m'}$$

(što znamo iz selekcionih pravila za CG koeficijente, uporediti § 7.2.3). Štaviše, leva strana ima određenu parnost: $(-1)^1(-1)^{l'} = -(-1)^{l'}$ (uporediti (8.1.30)). Stoga mora biti $c_2 = 0$, jer parnost odgovarajućeg sabirka ima suprotnu vrednost $(-1)^{l'}$. Dakle, za $l' > 0$ je $l = l' \pm 1$. Ako je $l' = 0$, onda iz gornjeg razlaganja $Y_1^0 Y_{l'}^{m'}$ sledi $l = 1$.

Konačna selekciona pravila glase

$$\boxed{m = m',\ l = |l' \pm 1|}. \qquad (10.1.36a,b)$$

Selekciona pravila (10.1.36) slede iz Wigner-Eckart-ovog teorema na sledeći način. Pošto je $\hat{H}'$ z-komponenta vektorskog operatora, to znači da je istovremeno i nulta standardna komponenta ireducibilnog tenzorskog operatora prvog reda, a svojstveni bazis od $\hat{H}_0$ je standardni bazis za $\hat{\mathbf{l}}$. Selekciona pravila Wigner-Eckart-ovog teorema stoga imaju za posledicu da $\langle ml \mid \hat{H}' \mid m'l' \rangle$ može biti različito od nule samo ako $m = m'$ i $l = l'-1, l', l'+1$ za $l' \geq 1$, a samo za $l = 1$ ako je $l' = 0$.

Ako primenimo i Wigner-Eckart-ov teorem za operator prostorne inverzije (što možemo, pošto je $\hat{H}'$, neparan operator, uporediti (8.1.17) i iznad toga), onda još otpada i mogućnost $l = l'$.

Odmah sledi $E^{(1)} = \langle l = m = 0 \mid \hat{H}' \mid l = m = 0 \rangle = 0$, a u drugoj popravci preostaje jedan sabirak $E^{(2)} = \sum_{l>0} \frac{\sum_{m=-l}^{l} |\langle l = m = 0 \mid \hat{H}' \mid lm \rangle|^2}{-\frac{\hbar^2}{2mr_0^2}l(l+1)} = -\frac{mr_0^2}{\hbar^2}|\langle l = m = 0 \mid \hat{H}' \mid l = 1, m = 0 \rangle|^2$.

Ispostavlja se da je $\langle Y_0^0(\theta,\varphi) \mid \cos\theta \mid Y_1^0(\theta,\varphi) \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$, te osnovni nivo Stark-ovog efekta rotatora u drugoj aproksimaciji glasi

$$\boxed{E_{\overline{n}}^0 + E^{(1)} + E^{(2)} = 0 + 0 + E^{(2)} = -\frac{mr_0^2}{3\hbar^2}E^2 d^2}. \qquad (10.1.37)$$

Dakle, osnovni nivo se dobija upravo od druge popravke i zato ceo efekat nosi naziv kvadratnog Stark-ovog efekta.

10.1.6 Uklanjanje degeneracije pomoću grupe simetrije hamiltonijana

Teorija stacionarnih perturbacija nedegenerisanog nivoa, čijem izlaganju je posvećen ovaj odeljak, znatno je jednostavnija od teorije stacionarnih perturbacija degenerisanog nivoa, koju ćemo proučavati u sledećem odeljku. Stoga je poželjno da se problem degenerisanog nivoa svede na problem nedegenerisanog kad god je to moguće. Pomenuto svođenje težeg problema na lakši

može se često postići ako imamo grupu simetrija $\{\hat{U}(g) \mid g \in G\}$ u prostoru stanja sistema i to takvu da je grupa simetrije i neperturbisanog hamiltonijana, tj.

$$[\, \hat{U}(g), \hat{H}_0 \,] = 0, \ \forall g \in G, \tag{10.1.38}$$

i perturbacije, tj.

$$[\, \hat{U}(g), \hat{H}' \,] = 0, \ \forall g \in G \tag{10.1.39}$$

(onda je, naravno, grupa simetrije i perturbisanog hamiltonijana $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$).

U daljem izlaganju ograničićemo se na rotacionu grupu $G = \mathrm{R}(3)$, pošto je to najosnovniji i najvažniji primer pomenute grupe. Sve što ćemo reći prenosi se po analogiji na bilo koju drugu grupu simetrije pomenutih hamiltonijana.

Razložićemo prostor stanja $\mathcal{H}$ na višestruke ireducibilne invarijantne potprostore $\mathcal{V}_k$, koje smo uveli u § 6.3.4 i nazvali "ormari sa fiokama" (videti i § 8.3.10). Zapravo, nastavimo razlaganje do potprostora $\mathcal{V}_{km}$ (do "fioka"):

$$\mathcal{H} = \oplus_k \oplus_{m=-k}^{k} \quad \mathcal{V}_{km}. \tag{10.1.40}$$

Pretpostavimo da za reprezentaciju rotacione grupe $R(3)$ važe relacije (10.1.38) i (10.1.39). Onda se, kao što znamo (videti T 6.4.2), $\hat{H}_0$, $\hat{H}'$ i $\hat{H}$ redukuju u svakom potprostoru $\mathcal{V}_{km}$ i u svakom potprostoru $\mathcal{V}_k$ dovoljno je uzeti jedan potprostor $\mathcal{V}_{km}$, recimo $\mathcal{V}_{k,m=k}$, jer u svim ostalim potprostorima $\mathcal{V}_{km}$ unutar istog $\mathcal{V}_k$ svi ovi operatori se redukuju u ekvivalentne operatore ("u svim fiokama istog ormara nalazimo isto").

Na osnovu rečenog, ceo perturbacioni račun možemo sprovesti u po jednom potprostoru $\mathcal{V}_{k,m=k}$ za svako k. Često će se desiti da tu dobijemo nedegenerisan neperturbisani nivo $E^0_{\overline{n}}$.

Zadatak 10.1.10 Objasniti kako to da ne samo svaki nivo E_l krutog rotatora sa multiplicitetom $2l+1$ iz prethodnog paragrafa, već i svaki nivo E_n sa višestrukošću n^2 u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ elektrona u vodoniku sličnom atomu (9.1.23a) postaje nedegenerisan nivo gornjim postupkom.

Kao što proizlazi iz iskaza u ovom Zadatku, redukovanjem perturbacionog problema u $\mathcal{V}_{l,m_l=l}$ svaki nivo E_l krutog rotatora postaje nedegenerisan, tj. jednoznačno (s tačnošću do faznog faktora) mu odgovara svojstveni vektor $\mid l, m_l = l\,\rangle$. Na osnovu selekcionih pravila (10.1.36) se onda lako dobija druga popravka $E^{(2)}$ za E_l, a prva popravka $E^{(1)}$ je opet nula.

10.1.7 Niski pobuđeni nivoi atoma sa dva valentna elektrona

Kompletni hamiltonijan $\hat{H}$ elektronskog omotača od Z elektrona (u neutralnom atomu rednog broja Z) glasi:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{Z} \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^{Z} \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^{Z} f(r_i)\hat{\mathbf{l}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_i, \tag{10.1.41}$$

gde je

$$f(r_i) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r_i}\frac{\mathrm{d}V(r_i)}{\mathrm{d}r_i} \tag{10.1.42}$$

(uporediti (9.1.37)), a $V(r_i)$ je jednočestični potencijal, specifikovaćemo ga niže.

Anticipirajući malo sadržaj odeljka § 10.4, ukazaćemo na to da se iz sabirka dvočestičnog tipa kao što je $\sum_{i<j}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$ izdvaja jedan usrednjeni jednočestični potencijal $\hat{W}_i$ (specijalnom varijacionom metodom):

$$\sum_{i<j}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \sum_{i=1}^{Z} \hat{W}_i + \sum_{i<j}^{Z} \hat{V}_{ij}^{(\text{rez})}. \tag{10.1.43}$$

Preostali deo $\sum_{i<j}^{Z} \hat{V}_{ij}^{(\text{rez})}$ naziva se *rezidualnom interakcijom.* Za jednočestični potencijal $V(r_i)$ u (10.1.42) se uzima $(-\frac{Ze^2}{r_i} + \hat{W}_i)$.

U lakim i srednje teškim atomima član orbitno-spinskog sprezanja je znatno manji od rezidualne interakcije

$$\sum_{i=1}^{Z} f(r_i)\hat{\mathbf{l}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_i \ll \sum_{i<j}^{Z} \hat{V}_{ij}^{(\text{rez})} \tag{10.1.44}$$

i može se zanemariti. Definiše se neperturbisani hamiltonijan jednočestičnog tipa:

$$\boxed{\hat{H}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{Z} \hat{h}_i = \sum_{i=1}^{Z} (\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i} + \hat{W}_i)}, \tag{10.1.45}$$

a *rezidualna Coulomb-ova repulzija* je perturbacija $\hat{H}'$:

$$\boxed{\hat{H}' \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i<j}^{Z} \hat{V}_{ij}^{(\text{rez})}}. \tag{10.1.46}$$

Obično se izdvajanje usrednjenog repulzivnog potencijala $\sum_{i=1}^{Z} \hat{W}_i$ u (10.1.43) definiše tako da $\hat{W}_i$ ima rotacionu simetriju (u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}_i)$), te se potpuna klasifikacija stanja za jednočestični hamiltonijan $\hat{h}_i$ može pisati

$$\{|\, nlm_l m_s \rangle \mid n = 1, 2, \ldots; \, m_l = -l, \ldots, l; \, l = 0, 1, 2, \ldots; \, m_s = \pm\frac{1}{2}\}, \tag{10.1.47}$$

gde kvantni broj n jednočestičnih energetskih nivoa igra analognu ulogu kao glavni kvantni broj za elektron u vodoniku sličnom atomu. Usled rotacione simetrije spektar od $\hat{h}_i$ glasi $\{E_{nl}^0 \mid \forall n, \forall l\}$, tj. ne zavisi od m_l i m_s.

Svojstveni bazis za $\hat{H}_0$ možemo izgraditi po modelu nezavisnih čestica (uporediti § 9.4.3) u vidu Slater-ovih determinanti. Ali, ti Z-elektronski vektori nisu prilagođeni (u opštem slučaju) rotacionoj simetriji od $\hat{H}_0$ i od $\hat{H}'$. Zato je za rešavanje perturbacionog problema pogodniji jedan drugi svojstveni bazis za $\hat{H}_0$ konstruisan u *LS sprezanju*, u kom su jednočestični orbitni uglovni momenti l_i i $s_i = \frac{1}{2}$, $i = 1, \ldots, Z$, spregnuti u Z-elektronski ukupni orbitni uglovni moment L odnosno u Z-elektronski ukupni spin S. Vektore u ovoj klasifikaciji stanja za $\hat{H}_0$ pisaćemo u vidu $|\, LSM_L M_S \lambda \rangle$.

Ograničićemo se sad na omotače sa *dva valentna elektrona* i uzećemo kao konkretan primer neutralni atom ugljenika C sa konfiguracijom (He)$2s^2 2p^2$, gde je (He)$2s^2$ *core*, a valentni elektroni su u stanju $2p$. Usrednjeni repulzivni jednočestični potencijal $\hat{W}_i$ u (10.1.43) se izračunava sa svih Z elektrona. Stoga se efekt zastiranja koji potiče od $Z - 2$ elektrona *core*-a uzima u obzir u modelu nezavisnih čestica $\hat{H}_0$ (ali ne i sa većom tačnošću).

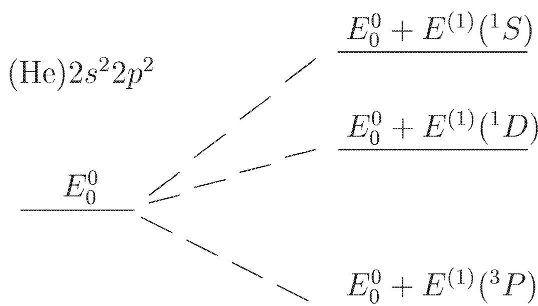
Zadatak 10.1.11 Pokazati da je osnovni nivo za $\hat{H}_0$ pomenutog atoma ugljenika degenerisan i to sa višestrukošću 15.

Rotaciona simetrija $\hat{H}_0$ i perturbacije $\hat{H}'$ omogućuje nam da otklonimo pomenutu degeneraciju redukujući ceo perturbacioni problem u jednu "fioku" "ormara sa fiokama". "Ormari" su sad potprostori sa oštrim vrednostima L i S (dvočestičnim), a "fioke" sa oštrim vrednostima L, S,M_L i M_S. Naime, sada zajednička grupa simetrije G od $\hat{H}_0$ i od $\hat{H}'$ sadrži posebno sve orbitne rotacije i posebno sve spinske rotacije.

Zadatak 10.1.12 Pokazati da je u svakoj "fioci", tj. potprostoru $\mathcal{V}(LSM_LM_S)$, ako su L i S međusobno kompatibilni u smislu Postulata antisimetričnosti (uporediti ispod Z 9.5.1), pomenuti osnovni nivo od $\hat{H}_0$ nedegenerisan.

Pošto princip antisimetričnosti dozvoljava ${}^3P$, ${}^1S$ i ${}^1D$ stanje naša dva valentna elektrona (dakle, ovi kvantni brojevi definišu "ormare" u kojima se pojavljuje naš perturbacioni problem), moramo izračunati energetske korekcije prvog reda $E^{(1)}({}^3P)$, $E^{(1)}({}^1S)$ i $E^{(1)}({}^1D)$.

Zadatak 10.1.13 Napisati formule za izračunavanje ovih popravki.



Slika 10.1: **Cepanje degenerisanog nivoa zbog rezidualne Coulomb-ove repulzije**.

Ispostavlja se da *linearni efekt* rezidualne Coulomb-ove repulzije, tj. prva aproksimacija ovog efekta, dovodi do cepanja neperturbisanog nivoa kao što je prikazano na Crtežu C 10.1.

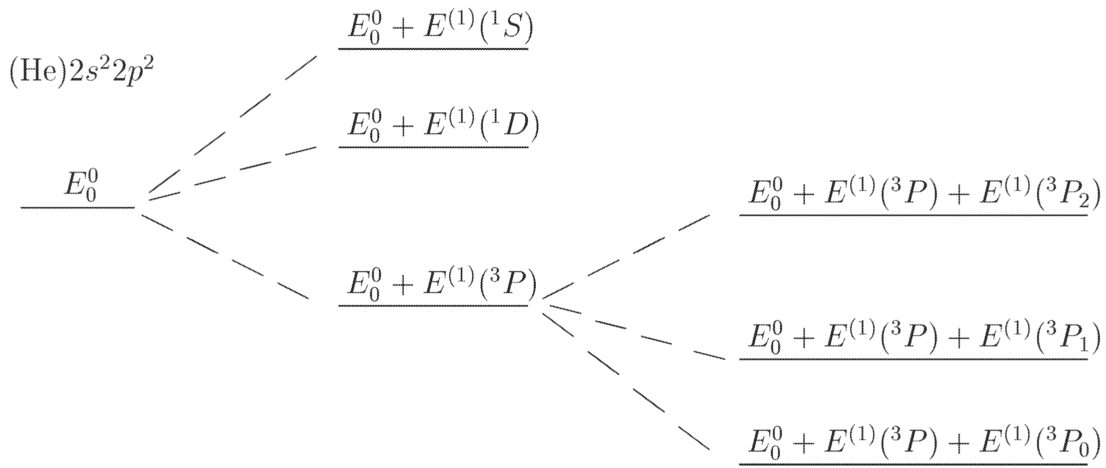
Da bismo uzeli u obzir i izostavljeni mali sabirak orbitno-spinskog sprezanja u hamiltonijanu, prvo ćemo redefinisati hamiltonijan $\hat{H}_0$. On će sad da obuhvati linearni efekt cepanja osnovnih nivoa sa Crteža C 10.1, a inače će biti kao malopre. Drugim rečima, bivši 15-struki degenerisani nivo E_0 zamenjujemo nedegenerisanim nivoom $E_0^0 + E^{(1)}({}^1S)$, kome i dalje odgovara stanje $\mid L = S = M_L = M_S = 0, \lambda \rangle$; zatim 5-struko degenerisanim nivoom $E_0^0 + E^{(1)}({}^1D)$ i, najzad, 9-struko degenerisanim nivoom $E_0^0+E^{(1)}({}^3P)$ (sve sa nepromenjenim svojstvenim stanjima). Ostale svojstvene vektore i svojstvene vrednosti od $\hat{H}_0$ ostavićemo nepromenjene (jer viši nivoi malo utiču na korekcije osnovnog nivoa). Za novu perturbaciju ćemo uzeti $\hat{H}' = \sum_{i=1}^{Z} f(r_i)\hat{\mathbf{l}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_i$ (uporediti (10.1.41) i (10.1.42)).

Zadatak 10.1.14 Pokazati da se sad za zajedničku grupu simetrije od $\hat{H}_0$ i $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ ne može više uzeti grupa svih rotacija posebno u ukupnom orbitnom prostoru i posebno u ukupnom spinskom prostoru, ali da umesto toga možemo uzeti grupu svih rotacija u sveukupnom (orbitno-spinskom) prostoru stanja dva elektrona.

Zadatak 10.1.15 Pokazati da uzimanjem $\mathcal{V}(LSJ)$ potprostora za "ormare", a $\mathcal{V}(LSJM_J)$ potprostora za "fioke", potpuno uklanjamo degeneraciju pomenuta dva degenerisana najniža nivoa od novog $\hat{H}_0$.

Zadatak 10.1.16 Napisati formulu za izračunavanje novih popravki prvog reda: $E^{(1)}({}^1S_0)$, $E^{(1)}({}^1D_2)$, $E^{(1)}({}^3P_2)$, $E^{(1)}({}^3P_1)$ i $E^{(1)}({}^3P_0)$.

Ispostavlja se da se neperturbisani nivo $E_0 + E^{(1)}({}^3P)$ cepa kao što ja prikazano na Crtežu C 10.2.



Slika 10.2: **Cepanje neperturbisanog nivoa** $E_0^0 + E^{(1)}(^3P)$.

Zadatak 10.1.17 Objasniti zašto se degenerisani nivo $E_0 + E^{(1)}(^3P)$ ne cepa (kao što je prikazano na Crtežu C 10.2).

Ispostavlja se da jačina rezidualne intarakcije raste samo sa $\sqrt{Z}$, a jačina spin-orbitnog sprezanja raste sa Z^2. Postoji jedan region teških atoma (oko olova) u kome su pomenute dve interakcije otprilike iste jačine (tzv. region intermedijernog sprezanja). Ovde se linearni efekti mogu računati samo u jednom jedinstvenom koraku uzimajući obe interakcije zajedno kao perturbaciju.

U regionu veoma teških atoma orbitno-spinsko sprezanje je dominantno u odnosu na rezidualnu interakciju. Tu se model nezavisne čestice redefiniše tako da se u $\hat{H}_0$ u (10.1.45) uključuje i spin-orbitno sprezanje. Onda se potpuna klasifikacija stanja za jednočestični hamiltonijan $\hat{h}_i$ sastoji od vektora vida $|\, nljm_j \,\rangle$.

U sledećem koraku sprežemo sve $\hat{\mathbf{j}}_i$, $i = 1, 2, \ldots, Z$, u ukupno J i M_J. U ovom tzv. jj sprezanju svojstveni bazis za $\hat{H}_0$ je standardan bazis za $\hat{\mathbf{J}}$ ili za grupu sveukupnih rotacija (grupu simetrije za $\hat{H}_0$ i za $\hat{H}$) i sastoji se od vektora vida $|\; JM_J\lambda \,\rangle$. I ovde se prelazi na $\mathcal{V}(J)$ kao "ormare", odnosno na $V(JM_J)$ kao "fioke". Tako se dobija linearni efekt od Coulomb-ove rezidualne repulzije kao perturbacije.

10.1.8 Coulomb-ova energija jezgra

Ilustrovaćemo korisnost rezultata iz paragrafa § 10.1.6 i na primeru izračunavanja veličine iz naslova. U ovom slučaju imamo jedan veoma složen problem, jer neperturbisani hamiltonijan $\hat{H}_0$ obuhvata čisto nuklearnu interakciju između ovih parova nukleona (imamo u jezgru Z protona i N neutrona, dakle $Z + N$ nukleona). Ova interakcija je veoma složena i mi u stvari ne znamo rešenje svojstvenog problema od $\hat{H}_0$. Moraćemo to zaobići tipičnim veštim domišljanjem.

Perturbacija je celokupna Coulomb-ova interakcija između ovih parova protona:

$$\hat{H}' \overset{\text{def}}{=} \sum_{i<j}^{Z} \frac{e^2}{r_{ij}}. \tag{10.1.48}$$

Prostor stanja jezgra glasi:

$$\mathcal{H} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{V}_a^{(p)} \otimes \mathcal{V}_a^{(n)}, \tag{10.1.49}$$

gde je $\mathcal{V}_a^{(p)}$ fermionski prostor (tj. antisimetrični potprostor) Z-identičnih protona, a $\mathcal{V}_a^{(n)}$ je analogni prostor N-identičnih neutrona.

Pretpostavićemo da neperturbisani nivo $E_{\overline{n}}^0$ ima (kao što je to obično slučaj) kvantne brojeve J i Π (sveukupni uglovni moment i parnost). To u stvari znači da odgovarajući svojstveni vektori od $\hat{H}_0$ imaju vid $|\,\Pi J M_J\,\rangle$. Pretpostavićemo takođe da je nivo $E_{\overline{n}}^0$ samo $(2J+1)$ puta degenerisan i da M_J prebrojava degenerisane svojstvene vektore (što je isto tako obično slučaj).

Pošto rotaciona simetrija važi i za čisto nuklearnu interakciju, tj. za $\hat{H}_0$, i za Coulomb-ovu interakciju, tj. za $\hat{H}'$, možemo, kao što je objašnjeno u paragrafu § 10.1.6, da redukujemo ceo perturbacioni problem u potprostor $\mathcal{V}(J, M_J = J)$ (tj. u prvu "fioku" "ormara" $\mathcal{V}(J)$). Ovde nivou $E_{\overline{n}}^0$ odgovara samo jedno stanje $|\,\Pi J, M_J = J, \lambda\,\rangle$.

Računaćemo Coulomb-ovu energiju E_C *u prvoj aproksimaciji*, to će reći da ćemo je izračunati u vidu prve popravke $E^{(1)}$ na $E_{\overline{n}}^0$ (vrednost samog nivoa $E_{\overline{n}}^0$ ne znamo i ne treba nam). Prema tome,

$$E_C \stackrel{\text{def}}{=} E_{\overline{n}} - E_{\overline{n}}^0 \approx E^{(1)} = \langle \Pi J, M_J = J, \lambda \,|\, \sum_{i<j}^{Z} \frac{e^2}{r_{ij}} \,|\, \Pi J, M_J = J, \lambda\,\rangle. \tag{10.1.50}$$

Sad ćemo se upustiti u malu digresiju. Rešićemo problem kako sve sabirke u operatoru interakcije $\sum_{i<j} \hat{V}_{ij}$ (to je $\frac{e^2}{r_{ij}}$ u (10.1.50)) da svedemo na $\hat{V}_{12}$ pomoću pogodnih permutacija. Ovaj se problem postavlja zato što u (10.1.50) izračunavamo (kao što je često slučaj) matrični element od $\sum_{i<j} \hat{V}_{ij}$ između dva antisimetrična stanja, a na njih permutacije deluju jednostavno.

Lema 10.1.2 *Neka je dato N hermitskih ili unitarnih operatora $\hat{A}_1, \hat{B}_2, \ldots, \hat{X}_N$ (ne nužno ekvivalentnih) koji deluju u jednočestičnim prostorima $\mathcal{H}_1^{(u)}$, odnosno $\mathcal{H}_2^{(u)}$, odnosno... ,odnosno $\mathcal{H}_N^{(u)}$ sistema od N identičnih fermiona. Neka je, osim toga, data operatorska funkcija $\hat{f}(\hat{A}_1, \hat{B}_2, \ldots, \hat{X}_N)$, koja deluje u $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$. Onda*

$$\hat{P}\hat{f}(\hat{A}_1, \hat{B}_2, \ldots, \hat{X}_N)\hat{P}^{-1} = \hat{f}(\hat{A}_1, \hat{B}_2, \ldots, \hat{X}_N), \ \forall p \in \Sigma_N, \tag{10.1.51a}$$

gde je, na primer

$$\hat{A}_{p_1} = \hat{J}_{p_1 \leftarrow 1} \hat{A}_1 \hat{J}_{p_1 \leftarrow 1}^{-1} \text{ itd.} \tag{10.1.51b}$$

(drugim rečima, $\hat{A}_1$ je "prenesen" iz $\mathcal{H}_1^{(u)}$ u $\mathcal{H}_{p_1}^{(u)}$ itd.).

Dokaz: Neka je $\{|\,n_i\,\rangle \mid \forall n_i\}$ svojstveni bazis od $\hat{O}_i$ u $\mathcal{H}_1^{(u)}$, gde je $\hat{O}_i \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}_1$ ili $\hat{O}_i \stackrel{\text{def}}{=} \hat{B}_2$ ili ... već prema tome da li je $i = 1$ ili $i = 2$ ili ... $i = 1, ..., N$. (Bazis se sastoji delom i od uopštenih vektora ako $\hat{O}_i$ ima i kontinualni spektar.) Pođimo od $\hat{P}$-lika indukovanog bazisa u $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$, tj. od $\{\hat{P}\,|\,n_1\,\rangle\,|\,n_2\,\rangle \ldots |\,n_N\,\rangle \mid \forall n_i,\ i = 1, \ldots, N\}$ i primenimo na vektore ovog bazisa levu stranu od (10.1.51a).

Sledi $[\hat{P}\hat{f}(\hat{A}_1, \hat{B}_2, \ldots, \hat{X}_N)\hat{P}^{-1}]\hat{P}\,|\,n_1\,\rangle \ldots |\,n_N\,\rangle = f(a_{n_1}, b_{n_2}, \ldots, x_{n_N})\,|\,n_{p_1^{-1}}\,\rangle \ldots |\,n_{p_N^{-1}}\,\rangle$. Desna strana od (10.1.51a) primenjena na isti bazisni vektor daje

$$\hat{f}(\hat{A}_{p_1}, \hat{B}_{p_2}, \ldots, \hat{X}_{p_N})\hat{P}\,|\,n_1\rangle \ldots |\,n_N\rangle = \hat{f}(\hat{A}_1, \ldots, \hat{X}_N)\,|\,n_{p_1^{-1}}\rangle \ldots |\,n_{p_N^{-1}}\rangle = f(a_{n_1}, b_{n_2}, \ldots, x_{n_N})\,|\,n_{p_1^{-1}}\rangle \ldots |\,n_{p_N^{-1}}\rangle.$$

Da bi se shvatio poslednji korak, treba uočiti da na primer $\hat{A}_{p_1}$ deluje na p_1-ti ket, a tu nailazi na stanje $|\,n_{p_1^{-1}}\,\rangle = |\,n_1\,\rangle$, koje je svojstveni vektor od $\hat{A}$ sa svojstvenom vrednošću a_{n_1} itd. Što se tiče operatorske funkcije

$\hat{f}$ i brojne funkcije f, u stvari je *a priori* zadata brojna funkcija, a ona definiše operatorsku preko spektralnog razlaganja

$$\hat{f}(\hat{A}_1, \ldots, \hat{X}_N) = \sum_{n_1} \ldots \sum_{n_N} f(a_{n_1}, b_{n_2}, \ldots, x_{n_N}) \mid n_1 \rangle \ldots \mid n_N \rangle \langle n_1 \mid \ldots \langle n_N \mid . \tag{10.1.52}$$

(Ako je f polinom, onda se ispostavlja da je $\hat{f}$ isti polinom operatora.) *Q. E. D.*

Korolar 10.1.1 *Oparator interakcije i-te i j-te čestice svodi se na operator interakcije prve i druge čestice na sledeći način*

$$\hat{V}_{ij} = \hat{P}\hat{V}_{12}\hat{P}^{-1}, \tag{10.1.53a}$$

gde $\hat{P}$ *u* $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ *reprezentuje permutaciju p:*

$$p \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \ldots & N \\ i & j & \ldots & p_N \end{pmatrix} \tag{10.1.53b}$$

(drugim rečima, $p_1 = i$, $p_2 = j$,... $N \geq 3$ *proizvoljno).*

Dokaz: Zamišljamo $\hat{V}_{12}$ kao određenu funkciju osnovnih skupova opservabli: $\hat{V}_{12} = \hat{f}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{s}}_1; \hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{p}}_2, \hat{\mathbf{s}}_2)$ (osnovni skup je ovde uopštenje jedne opservable u Lemi L 10.1.2). Iz Leme L 10.1.2 onda sledi $\hat{P}\hat{V}_{12}\hat{P}^{-1} = \hat{f}(\hat{\mathbf{r}}_{p_1}, \hat{\mathbf{p}}_{p_1}, \hat{\mathbf{s}}_{p_1}; \hat{\mathbf{r}}_{p_2}, \hat{\mathbf{p}}_{p_2}, \hat{\mathbf{s}}_{p_2})$. Očigledno, ako i samo ako $p_1 = i$, $p_2 = j$, onda važi (10.1.53a). *Q. E. D.*

Vratimo se sad iz naše digresije i nastavimo usrednjavanje Coulomb-ove energije E_C u prvoj aproksimaciji. Iz (10.1.53a) sledi

$$E^{(1)} = \sum_{i<j}^{Z} \langle \Pi J, M_J = J, \lambda \mid \hat{P}\frac{e^2}{r_{12}}\hat{P}^{-1} \mid \Pi J, M_J = J, \lambda \rangle = \frac{Z(Z-1)}{2}\epsilon, \tag{10.1.54a}$$

$$\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} \langle \Pi J, M_J = J, \lambda \mid \frac{e^2}{r_{12}} \mid \Pi J, M_J = J, \lambda \rangle \tag{10.1.54b}$$

(jer $\hat{P}$ i $\hat{P}^{-1}$, sa p datim sa (10.1.53b), deluju na svaki vektor iz $\mathcal{V}_a^{(p)}$ jednako i to kao $(-1)^p = (-1)^{p^{-1}}$, pa se ta dva faktora potiru, a $Z(Z-1)/2$ je broj parova protona).

Dalje,

$$\epsilon = \sum_{m_{s1}} \ldots \sum_{m_{s(Z+N)}} \int \ldots \int |\Phi_{\Pi J, M_J = J, \lambda}|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \ldots \mathrm{d}\mathbf{r}_{Z+N}, \tag{10.1.55}$$

gde $\Phi_{\Pi J, M_J = J, \lambda}(\mathbf{r}_1, m_{s1}; \ldots; \mathbf{r}_{Z+N}, m_{s(Z+N)})$ reprezentuje apstraktni vektor $\mid \Pi J, M_J = J, \lambda \rangle$ u koordinatno-spinskoj reprezentaciji.

Pošto se $r_{12} \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ u (10.1.55) tiče samo integrala po $\mathbf{r}_1$ i $\mathbf{r}_2$, sve ostale integracije i sve sumacije se mogu odmah izvršiti. Time sa vektora stanja celog sistema prelazimo na redukovani statistički operator $\hat{\rho}_{12}$, koji se odnosi na orbitne stepene slobode prve dve čestice (uporediti (4.4.8a)). Dijagonalni elementi od $\hat{\rho}_{12}$ su

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \mid \hat{\rho}_{12} \mid \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{m_{s1}} \ldots \sum_{m_{s(Z+N)}} \int \ldots \int |\Phi_{\Pi J, M_J = J, \lambda}|^2 \mathrm{d}\mathbf{r}_3 \ldots \mathrm{d}\mathbf{r}_{Z+N}. \tag{10.1.56}$$

Na osnovu (10.1.55), (10.1.56) može prostije da se piše u vidu

$$\epsilon = \int\int \frac{e^2}{r_{12}} \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\, \mathrm{d}\mathbf{r}_1\, \mathrm{d}\mathbf{r}_2. \tag{10.1.57}$$

Pošto se $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ interpretira kao gustina verovatnoće (nalaženja istovremeno prve čestice u $\mathbf{r}_1$ i druge u $\mathbf{r}_2$, uporediti (4.3.12), fizički smisao formule (10.1.57) je izračunavanje srednje Coulomb-ove potencijalne energije dva protona u jezgru.

Pošto ne znamo $\mid \Pi J, M_J = J, \lambda \rangle$, ne znamo ni $\hat{\rho}_{12}$. Sad ćemo definisati jedan dosta grubi model za izračunavanje $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Prvo ćemo pretpostaviti da između verovatnoća nalaženja čestica nema korelacija, tj. da se može pisati

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \rho(\mathbf{r}_1)\rho(\mathbf{r}_2). \tag{10.1.58}$$

Zbog identičnosti protona, radi se o istoj funkcionalnoj zavisnosti u $\rho(\mathbf{r}_1)$ i u $\rho(\mathbf{r}_2)$. Druga naša pretpostavka (time je završena definicija modela) sastoji se u tome da je unutar izvesne sfere poluprečnika R verovatnoća nalaženja svugde jednaka, a van te sfere da je nula:

$$\rho(\mathbf{r}) \overset{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{1}{\frac{4}{3}\pi R^3}, & r \leq R \\ 0, & r > R \end{cases}. \tag{10.1.59}$$

Formule (10.1.59), (10.1.58), (10.1.57) i (10.1.54a) najzad dovode do rezultata

$$E_C \approx \frac{3}{5} Z(Z-1)\frac{e^2}{R}, \tag{10.1.60a}$$

a R, poluprečnik jezgra je, prema jednoj empirijskoj formuli dat sa,

$$R = 1,45(Z+N)^{\frac{1}{3}} 10^{-13}\text{cm}. \tag{10.1.60b}$$

Koliko god da je grub naš model u kom smo izračunali E_C, dobijeni razultati su ipak dovoljno tačni za testiranje hipoteze o izospinskoj nezavisnosti čisto nuklearne interakcije (uporediti § 8.5.2), čija je neposredna posledica da se energije veze u jezgrima koja pripadaju istoj izobari (izobara je definisana sa fiksiranim $Z + N$, uporediti § 8.5.5) mogu razlikovati samo za E_C.

10.1.9 Popravka energije i stanja p-tog reda

Da bismo izračunali popravke iz naslova, ispišimo iz osnovne jednakosti (10.1.7) sve veličine p-tog reda (i skratimo a^p):

$$\hat{H}_0 \mid p \rangle + \hat{H}' \mid p-1 \rangle = E^0_{\overline{n}} \mid p \rangle + \sum_{q=1}^{p-1} E^{(q)} \mid p-q \rangle + E^{(p)} \mid \overline{n} \rangle. \tag{10.1.61}$$

Da bismo izračunali $E^{(p)}$, pomnožimo (10.1.61) skalarno sa $\langle \overline{n} \mid$. Usled $\langle \overline{n} \mid \hat{H}_0 = \langle \overline{n} \mid E^0_{\overline{n}}$ i činjenice da je $\mid \overline{n} \rangle$ ortogonalno na popravku stanja bilo kog reda (to sledi iz (10.1.15) kad se tu zameni (10.1.6)), sledi

$$\boxed{E^{(p)} = \langle \overline{n} \mid \hat{H}' \mid p-1 \rangle,\ p = 2, 3, \ldots}. \tag{10.1.62}$$

Treba zapaziti da usrednjavanje popravke energije p-tog reda zahteva poznavanje popravke stanja $(p-1)$-tog reda.

Da bismo iz (10.1.61) izračunali $|\,p\,\rangle$, pomnožimo (10.1.61) skalarno sa $\langle n\lambda\,|$, $n \neq \overline{n}$ (imajući u vidu da je $\langle\,\overline{n}\mid p\rangle = 0$): $E^0_n\langle\, n\lambda \mid p\rangle + \langle n\lambda \mid \hat{H}' \mid p-1\,\rangle = E^0_{\overline{n}}\langle\, n\lambda \mid p\rangle + \sum_{q=1}^{p-1} E^{(q)}\langle\, n\lambda \mid p-q\rangle$. Odavde sledi

$$\boxed{\langle\, n\lambda \mid p\rangle = \frac{1}{E^0_{\overline{n}}-E^0_n}(\langle n\lambda \mid \hat{H}' \mid p-1\,\rangle - \sum_{q=1}^{p-1} E^{(q)}\langle\, n\lambda \mid p-q\rangle),\ p = 2,3,\ldots} \tag{10.1.63}$$

Dakle, za izračunavanje popravke stanja p-tog reda moramo prethodno znati sve popravke energije i stanja do $(p-1)$-tog reda.

Zadatak 10.1.18 Dokazati da se (10.1.63) može kompaktnije prepisati kao

$$|\,p\,\rangle = (E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}(\hat{H}' \mid p-1\,\rangle - \sum_{q=1}^{p-1} E^{(q)} \mid p-q\,\rangle),\ p = 2,3,\ldots \tag{10.1.64}$$

(Kada operatorom $(E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}$ delujemo nalevo, na primer na $\langle\overline{n}\,|$, onda ga treba pisati u vidu $\hat{Q}(E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}$. Za primenu ovog operatora samo na desno, tj. samo na ketove, levi $\hat{Q}$ je nepotreban.)

10.2 Osnovi teorije stacionarne pertubacije degenerisanog nivoa

U ovom odeljku ćemo izložiti osnovne rezultate teorije smetnji u slučaju kada ni neperturbisani hamiltonijan $\hat{H}_0$ ni perturbacija $\hat{H}'$ ne zavise od vremena, ali, za razliku od slučaja u prethodnom odeljku, posmatrani neperturbisani energetski nivo $E^0_{\overline{n}}$ je degenerisan. Izvešćemo za opšti slučaj popravku energije prvog reda. Popravku drugog reda za energiju i popravku prvog reda za stanje izvešćemo za specifični slučaj kada se degeneracija otklanja u prvoj aproksimaciji. Prikazaćemo linearni Stark-ov efekt pobuđenih stanja vodonikovog atoma kao ilustraciju.

10.2.1 Uvod

U teoriji stacionarnih perturbacija degenerisanog nivoa takođe imamo od vremena nezavisne operatore $\hat{H}_0$, $\hat{H}'$, $\hat{H}$ i razvijamo $\hat{H}(a) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{H}_0 + a\hat{H}'$ u Taylor-ov red po a oko $a = 0$. Zapravo, svojstvenu jednakost perturbisanog hamiltonijana $\hat{H}$ opet pišemo u vidu (prepisujemo (10.1.7), samo umesto $|\,\overline{n}\,\rangle$ stavljamo $|\,0\,\rangle$):

$$(\hat{H}_0 + a\hat{H}')(|\,0\,\rangle + a\,|\,1\,\rangle + a^2\,|\,2\,\rangle + \ldots) = (E^0_{\overline{n}} + aE^{(1)} + a^2E^{(2)} + \ldots)(|\,0\,\rangle + a\,|\,1\,\rangle + a^2\,|\,2\,\rangle + \ldots). \tag{10.2.1}$$

Ova jednakost daje, sa svoje strane, sledeće jednakosti u nultom, prvom i drugom redu:

$$\hat{H}_0\,|\,0\,\rangle = E^0_{\overline{n}}\,|\,0\,\rangle, \tag{10.2.2}$$

$$\hat{H}_0\,|\,1\,\rangle + \hat{H}'\,|\,0\,\rangle = E^0_{\overline{n}}\,|\,1\,\rangle + E^{(1)}\,|\,0\,\rangle, \tag{10.2.3}$$

$$\hat{H}_0\,|\,2\,\rangle + \hat{H}'\,|\,1\,\rangle = E^0_{\overline{n}}\,|\,2\,\rangle + E^{(1)}\,|\,1\,\rangle + E^{(2)}\,|\,0\,\rangle, \tag{10.2.4}$$

Kao i u prethodnom odeljku, pretpostavljamo da smo rešili svojstveni problem neperturbisanog hamiltonijana $\hat{H}_0$: da je $\{E^0_{\overline{n}} \mid \forall n\}$ njegov čisto diskretni spektar, a $\{\mid n\lambda\rangle \mid \lambda = 1, 2, \dots, d_n; \forall n\}$ odgovarajući svojstveni bazis. (Opet se lako uopštava na slučaj kada $\hat{H}_0$ ima i kontinualni spektar, samo ako je neperturbisani nivo $E^0_{\overline{n}}$, koji posmatramo, diskretan.)

Jednakost (10.2.2) jasno kazuje da u nultoj aproksimaciji energije imamo, tzv. neperturbisani nivo $E^0_{\overline{n}}$, koji je svojstvena vrednost od $\hat{H}_0$. (Po pretpostavci ona je uvek diskretna, kao što smo već istakli.) Iz (10.2.2) se takođe vidi da je nulta aproksimacija stanja (koja odgovara $E^0_{\overline{n}}$), tzv. neperturbisano stanje $\mid 0\rangle$, svojstveni vektor od $\hat{H}_0$ i da kao takav pripada svojstvenoj vrednosti $E^0_{\overline{n}}$. U ovom odeljku, međutim, pretpostavljamo da je *neperturbisani nivo* $E^0_{\overline{n}}$ *degenerisan*. Prema tome, $\mid 0\rangle$ je *nepoznata* linearna kombinacija svojstvenih vektora $\{\mid \overline{n}\lambda\rangle \mid \lambda = 1, 2, \dots, d_{\overline{n}}\}$ od $\hat{H}_0$ i rešavanje moramo započeti u nultoj aproksimaciji.

Zamišljamo da neperturbisanom nivou $E^0_{\overline{n}}$ odgovara, s perturbisanih nivoa $E_1,\ E_2, \dots,\ E_s$ ("odgovaranje" opet znači da ovih s nivoa konvergira ka $E^0_{\overline{n}}$ kada $a \to +0$). Perturbisani nivoi su takođe po pravilu degenerisani. Neka su odgovarajući multipliciteti $D_1,\ D_2, \dots,\ D_s$. Onda imamo

$$D_1 + D_2 + \dots + D_s = d_{\overline{n}}, \tag{10.2.5}$$

jer prilikom kontinualne promene parametra a od jedan do nule ni jedna diskretna veličina, kao D_i, $i \doteq 1, \dots, s$ ili $\sum_{i=1}^{s} D_i$, ne može skokovito da se promeni.

Pretpostavljamo da izračunavamo jedan određeni perturbisani nivo, recimo E_1. Njega je najlakše fiksirati kada se radi o osnovnom nivou, a za druge nivoe E_1, izdvajanje vršimo pomoću određenih kvantnih brojeva (koji određuju taj nivo).

Pretpostavićemo da *sva* degeneracija od E_1 potiče od jedne poznate grupe simetrije G i da svi operatori u reprezentaciji te grupe komutiraju sa $\hat{H}_0$, $\hat{H}'$ i $\hat{H}$; da smo metodom izloženim u § 10.1.6 ceo perturbacioni problem sveli u jednu "fioku" jednog "ormara" reprezentacije grupe G i da smo tako dobili *nedegenerisani perturbisani nivo* E_1. U pomenutom invarijantnom potprostoru ("fioci") se sad sve redefiniše (spektar od $\hat{H}_0$, degeneracije itd.). Mi ćemo zadržati gornju notaciju, samo što je od sada prostor stanja ta jedna "fioka". Znači, postigli smo da u (10.2.5) imamo $D_1 = 1$. Isto tako, i dalje je $d_n > 1$, jer dopuštamo da $\hat{H}_0$ ima širu grupu simetrije nego $\hat{H}'$ (i $\hat{H}$).

10.2.2 Popravka energije prvog reda i neperturbisano stanje

Obeležimo sa $\hat{P}^0_{\overline{n}}$ svojstveni projektor od $\hat{H}_0$, koji projektuje na svojstveni potprostor definisan svojstvenom vrednošću $E^0_{\overline{n}}$ (sad je $\mathrm{Tr}\,\hat{P}^0_{\overline{n}} > 1$). Primenimo $\hat{P}^0_{\overline{n}}$ na (10.2.3):

$$\hat{H}_0\hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 1\rangle + \hat{P}^0_{\overline{n}}\hat{H}' \mid 0\rangle = E^0_{\overline{n}}\hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 1\rangle + E^{(1)}\hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 0\rangle. \tag{10.2.6}$$

Pošto $\hat{H}_0 = \sum_n E^0_n \hat{P}^0_n$ ($\hat{P}^0_n$ su svojstveni projektori), imamo $\hat{H}_0\hat{P}^0_{\overline{n}} = E^0_{\overline{n}}\hat{P}^0_{\overline{n}}$ (jer $\hat{P}^0_n\hat{P}^0_{\overline{n}} = \delta_{n\overline{n}}\hat{P}^0_{\overline{n}}$) i prvi sabirci na levoj i na desnoj strani se potiru. Ostaje

$$\hat{P}^0_{\overline{n}}\hat{H}' \mid 0\rangle = E^{(1)}\hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 0\rangle. \tag{10.2.7}$$

Jednakost nulte aproksimacije (10.2.2) kazuje da imamo $\hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 0\rangle = \mid 0\rangle$, stoga možemo na levoj strani od (10.2.7) $\mid 0\rangle$ zameniti sa $\hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 0\rangle$, a na desnoj strani možemo izostaviti $\hat{P}^0_{\overline{n}}$. Tako

najzad dolazimo do jednakosti:

$$\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 0 \rangle = E^{(1)} \mid 0 \rangle. \tag{10.2.8}$$

To znači da je $E^{(1)}$ svojstvena vrednost od $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}}$, a $\mid 0 \rangle$ je odgovarajući svojstveni vektor.

Svojstveni problem (10.2.8) se obično rešava dijagonalizacijom matrice koja u reprezentaciji neperturbisanog hamiltonijana, tj. u bazisu $\{\mid n\lambda \rangle \mid \lambda = 1, 2, \ldots, d_n, \forall n\}$, reprezentuje operator $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 0 \rangle$. U stvari dovoljno je uzeti $d_{\overline{n}} \times d_{\overline{n}}$ podmatricu (na dijagonali) matrice $\hat{H}'$, koja u istom bazisu reprezentuje $\hat{H}'$ (videti oivičenu podmatricu na Crtežu C 10.3(a)).

Treba zapaziti da se $\hat{H}'$ ne redukuje (u opštem slučaju) u svojstvenom potprostoru od $\hat{H}_0$ koji odgovara $E^0_{\overline{n}}$, što na matričnom jeziku znači da *nemamo* vandijagonalne podmatrice susedne našoj jednake nuli kao što imamo na Crtežu C 10.3(b). Stoga $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 0 \rangle$ znači neku vrstu "isecanja" podmatrice, koju, prema (10.2.8), treba dijagonalizovati. Često se kao sinonim za "dijagonalizovanje" koristi termin "rešavanje sekularnog problema". Znači, da bismo dobili prvu korekciju energije i (istovremeno!) stanje u nultoj aproksimaciji, moramo da rešimo sekularni problem "isečene" perturbacije $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}} \mid 0 \rangle$.

$$\begin{array}{ccc|cc}
\langle \overline{n},1 \mid \hat{H}' \mid \overline{n},1 \rangle & \cdots & \langle \overline{n},1 \mid \hat{H}' \mid \overline{n},d_{\overline{n}} \rangle & \langle \overline{n},1 \mid \hat{H}' \mid n \neq \overline{n},\lambda = 1 \rangle & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\langle \overline{n},d_{\overline{n}} \mid \hat{H}' \mid \overline{n},1 \rangle & \cdots & \langle \overline{n},d_{\overline{n}} \mid \hat{H}' \mid \overline{n},d_{\overline{n}} \rangle & \langle \overline{n},d_{\overline{n}} \mid \hat{H}' \mid n \neq \overline{n},\lambda = 1 \rangle & \cdots \\
\hline
\langle n \neq \overline{n},\lambda = 1 \mid \hat{H}' \mid \overline{n},1 \rangle & \cdots & \langle n \neq \overline{n},\lambda = 1 \mid \hat{H}' \mid \overline{n},d_{\overline{n}} \rangle & \langle n \neq \overline{n},\lambda = 1 \mid \hat{H}' \mid n \neq \overline{n},\lambda = 1 \rangle & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots
\end{array}$$

(a)

$$\begin{array}{c|c}
\square & 0 \\
\hline
0 & 0
\end{array}$$

(b)

Slika 10.3: **Popravka degenerisanog nivoa.** (a) *Matrica operatora* $\hat{H}'$ *i* (b) *odsečka* $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}}$ *(čije su svojstvene vrednosti prve popravke energije) u energetskoj reprezentaciji neperturbisanog hamiltonijana.*

10.2.3 Popravka energije drugog reda i korekcija stanja prvog reda

Sad ćemo ići dalje od $E^{(1)}$ pod jednom pretpostavkom: da smo dobili $E^{(1)}$ kao nedegenerisanu svojstvenu vrednost[10.2.1] od $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}}$ u (10.2.8), tj. da smo iz (10.2.8) izračunali jednoznačno (s tačnošću do faznog faktora) neperturbisano stanje $\mid 0 \rangle$. Ako ova pretpostavka ne stoji, teorija se znatno usložnjava i u nju nećemo ulaziti, niti ćemo izračunavati popravke više od druge (čak i ako važi pomenuta pretpostavka). Važenje pomenute pretpostavke se iskazuje rečima da smo *degeneraciju* d_n *uklonili u prvom redu aproksimacije.*

[10.2.1] Ako je čitaocu potrebna potpuna teorija perturbacija degenerisanog nivoa (za stacionarne $\hat{H}_0$ i $\hat{H}'$), videti: A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Vol. II, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1969; glava XVI, odeljak III.

Počnimo sa izračunavanjem $E^{(2)}$ iz (10.2.4). Množeći ovu jednakost skalarno sa $\langle 0 \mid$, sledi

$$\boxed{E^{(2)} = \langle 0 \mid \hat{H}' \mid 1 \rangle} \tag{10.2.9}$$

($\langle 0 \mid 1 \rangle = 0$, kao i u prethodnom odeljku, jer smo opet $\mid E_{\overline{n}} \rangle$ normirali na jediničnu projekciju na $\mid 0 \rangle$).

Dakle, za izračunavanje popravke energije drugog reda, neophodno je prethodno raspolagati ne samo sa $\mid 0 \rangle$, nego i sa popravkom stanja prvog reda.

Vektor $\mid 1 \rangle$ ćemo izračunati iz dve njegove projekcije. Naime, poći ćemo od projektorske jednakosti:

$$\hat{I} = \hat{Q}_0 + \hat{Q}_1 + \mid 0 \rangle\langle 0 \mid, \tag{10.2.10a}$$

gde je

$$\hat{Q}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \hat{I} - \hat{P}^0_{\overline{n}}, \tag{10.2.10b}$$

tj. komplementarni projektor od $\hat{P}^0_{\overline{n}}$. Definicija (10.2.10a) za $\hat{Q}_1$ može da se prepiše u vidu

$$\hat{Q}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \hat{P}^0_{\overline{n}} - \mid 0 \rangle\langle 0 \mid . \tag{10.2.10c}$$

Kao što smo rekli, $\langle 0 \mid 1 \rangle = 0$, to primenjujući (10.2.10a) na $\mid 1 \rangle$, sledi

$$\mid 1 \rangle = \hat{Q}_0 \mid 1 \rangle + \hat{Q}_1 \mid 1 \rangle. \tag{10.2.11}$$

Izračunaćemo svaki od sabiraka na desnoj strani posebno.

Primenom projektora $\hat{Q}_0$ na (10.2.3) dolazimo do

$$\hat{H}_0\hat{Q}_0 \mid 1 \rangle + \hat{Q}_0\hat{H}' \mid 0 \rangle = E^0_{\overline{n}}\hat{Q}_0 \mid 1 \rangle. \tag{10.2.12}$$

Zadatak 10.2.1 Objasniti zašto $[\, \hat{Q}_0, \hat{H}_0 \,] = 0$.

Iz (10.2.12) odmah sledi

$$\hat{Q}_0 \mid 1 \rangle = (E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}_0\hat{H}' \mid 0 \rangle. \tag{10.2.13}$$

Zadatak 10.2.2 Objasniti zašto iz (10.2.3) ne možemo izračunati i $\hat{Q}_1 \mid 1 \rangle$.

Primenom projektora $\hat{Q}_1$ na (10.2.4) dobija se

$$\hat{Q}_1(\hat{H}_0 - E^0_{\overline{n}}) \mid 2 \rangle + \hat{Q}_1\hat{H}' \mid 1 \rangle = E^{(1)}\hat{Q}_1 \mid 1 \rangle, \tag{10.2.14}$$

jer $\hat{Q}_1 \mid 0 \rangle = 0$ (prema (10.2.10c)). Podsetimo se da, obeležavajući sa $\mathcal{R}(\ldots)$ oblast likova operatora, potprostorska relacija $\mathcal{R}(\hat{Q}_1) < \mathcal{R}(\hat{P}^0_{\overline{n}})$ na jeziku projektora glasi: $\hat{Q}_1\hat{P}^0_{\overline{n}} = \hat{Q}_1$. Zbog ove mogućnosti da dopišemo ili izbrišemo $\hat{P}^0_{\overline{n}}$ desno od $\hat{Q}_1$, sledi $\hat{Q}_1\hat{H}_0 = \hat{Q}_1\sum_n \hat{P}^0_n E^0_n = \hat{Q}_1\hat{P}^0_{\overline{n}}E^0_{\overline{n}} + \sum_{n\neq\overline{n}} \hat{Q}_1\hat{P}^0_{\overline{n}}\hat{P}^0_n E^0_{\overline{n}}$ ($\hat{P}^0_{\overline{n}}\hat{P}^0_n = 0,\ \forall n \neq \overline{n}$). Stoga prvi sabirak u (10.2.14) otpada i ostaje samo

$$\hat{Q}_1\hat{H}' \mid 1 \rangle = E^{(1)}\hat{Q}_1 \mid 1 \rangle. \tag{10.2.15}$$

Na levoj strani od (10.2.15) ćemo u sledećem koraku zameniti $\hat{H}'$ sa $\hat{H}'\hat{I}$, a $\hat{I}$ sa desnom stranom od (10.2.10a) i uzećemo u obzir da $\langle\, 0 \mid 1 \rangle = 0$. Sledi

$$\hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_0 \mid 1\,\rangle + \hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_1 \mid 1\,\rangle = E^{(1)} \hat{Q}_1 \mid 1\,\rangle. \qquad (10.2.16)$$

Ovu jednakost možemo da rešimo po $\hat{Q}_1 \mid 1\,\rangle$:

$$\hat{Q}_1 \mid 1\,\rangle = (E^{(1)} - \hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_1)^{-1} \hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_0 \mid 1\,\rangle. \qquad (10.2.17)$$

(U stvari, drugi sabirak na levoj strani od (10.2.16) uzeli smo u vidu $(\hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_1) \hat{Q}_1 \mid 1\,\rangle$).

Zadatak 10.2.3 Pokazati:

a) da iz (10.2.10c) i (10.2.8) sledi da i $\mid 0\,\rangle\langle 0 \mid$ i $\hat{Q}_1$ komutiraju sa $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}}$ i

b) da $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}} = \hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_1 + \mid 0\,\rangle\langle 0 \mid \hat{H}' \mid 0\,\rangle\langle 0 \mid = \hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_1 + E^{(1)} \mid 0\,\rangle\langle 0 \mid$, a da iz pretpostavke da je $E^{(1)}$ nedegenerisano rešenje u (10.2.8) sledi da $\hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_1$ nema svojstvenu vrednost $E^{(1)}$;

c) da se operator $(E^{(1)} - \hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_1)$ redukuje u nesingularan operator u $\mathcal{R}(\hat{Q}_1)$, te je invertovanje operatora u (10.2.17) opravdano.

Zamena $\hat{Q}_0 \mid 1\,\rangle$ iz (10.2.13) u (10.2.17) daje

$$\hat{Q}_1 \mid 1\,\rangle = (E^{(1)} - \hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_1)^{-1} \hat{Q}_1 \hat{H}' (E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)^{-1} \hat{Q}_0 \hat{H}' \mid 0\,\rangle. \qquad (10.2.18)$$

Najzad, iz (10.2.11), (10.2.13) i (10.2.18) imamo

$$\boxed{\mid 1\,\rangle = [\hat{I} + (E^{(1)} - \hat{Q}_1 \hat{H}' \hat{Q}_1)^{-1} \hat{Q}_1 \hat{H}'] (E^0_{\overline{n}} - \hat{H}_0)^{-1} \hat{Q}_0 \hat{H}' \mid 0\,\rangle}. \qquad (10.2.19)$$

Pretpostavimo da smo u svojstvenom potprostoru $\mathcal{R}(\hat{P}^0_{\overline{n}})$ od $\hat{H}_0$, koji odgovara neperturbisanom nivou $E^0_{\overline{n}}$, prešli sa prvobitnog podbazisa $\{\mid \overline{n}\lambda\,\rangle \mid \lambda = 1, \ldots, d_{\overline{n}}\}$ na nov podbazis, koji ćemo jednako obeležavati, a koji je svojstveni bazis od $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}}$ u $\mathcal{R}(\hat{P}^0_{\overline{n}})$, i to tako da: $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}} \mid \overline{n}, \lambda = 1\,\rangle = E^{(1)} \mid \overline{n}, \lambda = 1\,\rangle$, $\hat{P}^0_{\overline{n}} \hat{H}' \hat{P}^0_{\overline{n}} \mid n, \lambda\,\rangle = E^{(1)}_\lambda \mid \overline{n}, \lambda\,\rangle$, $\lambda = 2, \ldots, d_{\overline{n}}$. ($E^{(1)}_\lambda$, $\lambda > 1$ su popravke prvog reda koje od degenerisanog neperturbisanog nivoa $E^0_{\overline{n}}$ idu ka drugim perturbisanim nivoima $E_n \neq E_{\overline{n}}$).

Zadatak 10.2.4 Pokazati da iz (10.2.13) sledi

$$\boxed{n \neq \overline{n} \Rightarrow \langle\, n\lambda \mid 1 \rangle = \tfrac{\langle\, n\lambda \mid \hat{H}' \mid 0\,\rangle}{E^0_{\overline{n}} - E^0_n}}, \qquad (10.2.20a)$$

a da (10.2.18) dovodi do

$$\boxed{\lambda \neq 1 \Rightarrow \langle\, \overline{n}\lambda \mid 1 \rangle = \tfrac{1}{E^{(1)} - E^{(1)}_\lambda} \sum_{n' \neq \overline{n}} \sum_{\lambda'} \langle \overline{n}\lambda \mid \hat{H}' \mid n'\lambda'\,\rangle \tfrac{\langle\, n'\lambda' \mid \hat{H}' \mid 0\,\rangle}{E^0_{\overline{n}} - E^0_{n'}}}. \qquad (10.2.20b)$$

i da, najzad,

$$\boxed{\langle\, \overline{n}, \lambda = 1 \mid 1 \rangle = 0}. \qquad (10.2.20c)$$

10.2.4 Linearni Stark-ov efekt u vodonikovom atomu

Kao što je dobro poznato, Stark-ov efekt nastupa kada se kvantni sistam u čijem su sastavu naelektrisane čestice stavi u homogeno i konstantno električno polje. Efekt se sastoji u cepanju energetskih nivoa, slično kao Zeeman-ov efekt. Mi ćemo sad proučiti Starkov efekt u pobuđenom vodonikovom atomu. On se zove linearni, jer, kao što ćemo videti, efekt se može u dobroj približnosti računati u prvoj aproksimaciji perturbacione teorije[10.2.2].

Kao što sledi kvantizacijom odgovarajuće Hamilton-ove funkcije u klasičnoj teoriji elektromagnetnih pojava, hamiltonijan elektrona koji je u vodonikovom atomu izložen pomenutom delovanju spoljašnjeg polja **E** glasi:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + |e|Ez \tag{10.2.21}$$

(prostor stanja je $\mathcal{L}^2(\mathbf{r}) \otimes \mathbb{C}^2$, z-osa je duž električnog polja $\mathbf{E}$, čija je jačina $\mathbf{E}$).

Pod pretpostavkom (koja je u uobičajenim eksperimentima zadovoljena), da E nije dovoljno jako da nadvagne dominaciju Coulomb-ovog polja od jezgra $-\frac{e^2}{r}$ (r je malo!), smatraćemo sabirak $|e|Ez$ u (10.2.21) za *perturbaciju* $\hat{H}'$, a

$$\hat{H}_0 \overset{\text{def}}{=} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} \tag{10.2.22}$$

za *neperturbisani hamiltonijan.*

U odeljku § 9.1 rešili smo diskretni svojstveni problem vodoniku sličnog atoma. Pođimo od osnovnog nivoa $E^0_{\overline{n}} = E_{n=1}$ (n je na desnoj strani glavni kvantni broj), čiji je multiplicitet 2. Ovde nemamo linearni Stark-ov efekt, jer osnovno stanje (bilo koje iz pomenutog dvodimenzionalnog potprostora) ima određenu parnost ($\Pi = (-1)^l = (-1)^0 = +1$), a operator z u perturbaciji $\hat{H}'$ je neparan operator.

Zadatak 10.2.5 Objasniti kako iz selekcionog pravila za parnost (uporediti (8.1.17)) sledi da je svaki matrični element perturbacije $\hat{H}'$ u pomenutom svojstvenom potprostoru osnovnog nivoa $1s$ jednak nuli.

Zadatak 10.2.6 Napisati izraz za popravku drugog reda energije osnovnog nivoa (kvadratni Stark-ov efekt u $\mathcal{L}^2(r)$). Ograničiti se na sabirke koji odgovaraju diskretnom spektru od $\hat{H}_0$ i objasniti koji su matrični elementi nula usled selekcionih pravila. Od kojeg matričnog elementa očekujemo najveći doprinos?

Pređimo sad na prvi pobuđeni nivo $E^0_{\overline{n}} \overset{\text{def}}{=} E_{n=2}$ od $\hat{H}'$ koji ima multiplicitet 4 u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$. Već smo pojednostavili problem zanemarivši irelevantni spinski stepen slobode (jer sav $\hat{H}$ iz (10.2.21) deluje u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$). Dalje pojednostavljenje ćemo dobiti ako $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ razložimo na "ormare sa fiokama" u odnosu na zajedničku grupu simetrije G perturbisanog hamiltonijana $\hat{H}$ i neperturbisanog hamiltonijana $\hat{H}_0$.

Fizički je evidentno da za G možemo uzeti grupu svih vrtnji oko z-ose. "Ormari" su sad svojstveni potprostori[10.2.3] od $\hat{l}_z$, karakterisani magnetnim kvantnim brojem m_l.

[10.2.2]Linearni i kvadratni Stark-ov efekt (uporediti § 10.1) ne razlikuju se samo teorijski, već i eksperimentalno. Naime, linearni efekt je znatno "jači", tj. lakše ga je detektovati (i sa slabijom rezolucijom mernog aparata).

[10.2.3]Obratiti pažnju da je sad broj "fioka" jedan. Više od jedne "fioke" imamo samo u slučaju *nekomutativne* grupe simetrije G.

U svakom svojstvenom potprostoru $\mathcal{V}(m_l)$ od $\hat{l}_z$ ("ormaru") se sad redukuju $\hat{H}_0$, $\hat{H}'$ i $\hat{H}$, tj. ceo perturbacioni problem. Utvrdimo, pre svega, za koje vrednosti m_l, se u $\mathcal{V}(m_l)$ pojavljuje neperturbisani nivo $E_{\bar{n}}^0 \stackrel{\text{def}}{=} E_{n=2}$ koji posmatramo. Pošto $n = 2$ dopušta $l = 0, 1$, imamo $m_l = 0, \pm 1$. Uzećemo potprostor $\mathcal{V}(m_l = 0)$.

Zadatak 10.2.7 Pokazati da u potprostorima $\mathcal{V}(m_l = \pm 1)$ nemamo linearni Stark-ov efekt neperturbisanog nivoa $E_{n=2}$.

U potprostoru $\mathcal{V}(m_l = 0)$ neperturbisanom nivou $E_{n=2}$ odgovaraju dva svojstvena stanja od $\hat{H}_0$: $|\, n = 2, l = 0, m_l = 0\,\rangle$ i $|\, n = 2, l = 1, m_l = 0\,\rangle$, koja su uzajamno suprotne parnosti, te njihove linearne kombinacije nemaju određenu parnost. Zahvaljujući tome imamo linearni Stark-ov efekt.

Dve vrednosti prve popravke energije, tj. $E_1^{(1)}$ i $E_2^{(1)}$ su rešenja sekularnog problema:

$$\det\begin{pmatrix} |e|E\langle 2,0,0 \mid z \mid 2,0,0\,\rangle - E^{(1)} & |e|E\langle 2,0,0 \mid z \mid 2,1,0\,\rangle \\ |e|E\langle 2,1,0 \mid z \mid 2,0,0\,\rangle & |e|E\langle 2,1,0 \mid z \mid 2,1,0\,\rangle - E^{(1)} \end{pmatrix} = 0. \tag{10.2.23}$$

Zadatak 10.2.8 Pokazati da $\langle 2,0,0 \mid z \mid 2,0,0\,\rangle = \langle 2,1,0 \mid z \mid 2,1,0\,\rangle = 0$, te da iz (10.2.23) sledi

$$E_{1,2}^{(1)} = \pm |e|E|\langle 2,0,0 \mid z \mid 2,1,0\,\rangle|. \tag{10.2.24}$$

Kada u (10.2.24) zamenimo $\langle\, r,\theta,\varphi \mid 2,0,0\rangle = R_{n=2,l=0}(r)Y_{l=0}^{m_l=0}(\theta,\varphi)$ itd. i uzmemo konkretne funkcije R_{nl} i Y_l^m iz (9.1.27) odnosno (6.6.8, 6.6.9), onda možemo izračunati desnu stranu od (10.2.24): $\langle 2,0,0 \mid z \mid 2,1,0\,\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi\; r^2 \sin\theta (2(2a_0)^{-\frac{3}{2}}(1-\frac{r}{2a_0})\frac{1}{2\sqrt{\pi}}e^{-\frac{r}{2a_0}})r\cos\theta \cdot(\frac{1}{\sqrt{3}}(2a_0)^{-\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}e^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta) = \frac{1}{8a_0^4}\int_0^\infty \mathrm{d}r r^4(1-\frac{r}{2a_0})e^{-\frac{r}{a_0}}\int_0^\pi \mathrm{d}\theta \sin\theta\cos^2\theta = -3a_0$. Stoga,

$$E_{1,2}^{(1)} = \pm 3|e|Ea_0. \tag{10.2.25}$$

Zadatak 10.2.9 Pokazati da neperturbisana stanja $|\,0\rangle_{1,2}$ tj. stanja koja u nultom redu odgovaraju popravkama $E_{1,2}^{(1)}$ iz (10.2.25) (videti (10.2.8)) glase:

$$|\,0\,\rangle_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\,2,0,0\rangle \pm |\,2,1,0\,\rangle). \tag{10.2.26}$$

Zadatak 10.2.10 Proučiti linearni Stark-ov efekt za $n = 3$ u $\mathcal{V}(m_l = \pm 1)$, svojstvenim potprostorima od $\hat{l}_z$.

Zadatak 10.2.11 Neka je G' najmanja grupa koja sadrži sve vrtnje oko z-ose i refleksiju kroz xz-ravan. Pokazati:

a) da je G' zajednička grupa simetrije od $\hat{H}_0$ i $\hat{H}$ datih sa (10.2.22), odnosno (10.2.21);

b) da pomenuta refleksija prevodi $|\,m_l\,\rangle$ u $|\,-m_l\,\rangle$;

c) da se svaki "ormar sa fiokama" za G' može karakterisati sa $|m_l|$ i da za $m_l \neq 0$ ima po dve "fioke" (G je nekomutativna grupa!) i da se one karakterišu sa $\mathrm{sign}(m_l)$ (sign znači: predznak);

d) prodiskutovati rezultate prethodnog Zadatka u svetlosti simetrije G'.

Zadatak 10.2.12 Kad bismo umesto Stark-ovog imali Zeeman-ov efekt (umesto E jačinu magnetnog polja B, umesto $|e|$ magnetni dipolni moment elektrona), da li bi i onda G' iz prethodnog Zadatka bila zajednička grupa simetrije od $\hat{H}_0$ i $\hat{H}$? Ukazati na jednu moguću takvu grupu simetrije G i diskutovati G-deganeraciju perturbisanih nivoa.

10.3 Teorija vremenski zavisne perturbacije

U ovom poslednjem odeljku posvećenom teoriji perturbacije najzad rešavamo dinamički problem nekonzervativnog kvantnog sistema, tj. slučaj kada perturbisani hamiltonijan zavisi od vremena (ali ovi rezultati jednako važe i ako ne zavisi). Sada u fokus pažnje stupa evolucija proizvoljnog početnog stanja (a ne više svojstveni problem perturbisanog hamiltonijana). Izložićemo detaljnije integralni prilaz (preko evolucionog operatora), a samo ćemo nabaciti diferencijalni prilaz. Na kraju, proučićemo verovatnoću prelaza iz datog početnog neperturbisanog stanja u proizvoljno neperturbisano stanje u kasnijem trenutku i to u proizvoljnom redu aproksimacije.

10.3.1 Definicija problema i program teorije

Pretpostavljamo da imamo hamiltonijan $\hat{H}(t)$, koji može da zavisi od vremena i koji može da se napiše kao zbir dva člana

$$\boxed{\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t)}, \tag{10.3.1}$$

gde je $\hat{H}_0$ neperturbisani hamiltonijan, dominantni član koji ne zavisi od vremena; pretpostavljamo da je njegov svojstveni problem već rešen. Operator $\hat{H}'(t)$ je mali, tj. perturbacija, i može da zavisi od vremena; $\hat{H}(t)$ je perturbisani hamiltonijan.

Ako $\hat{H}_0$ nije kompletna opservabla, pretpostavljamo da smo $\hat{H}_0$ na pogodan način dopunili do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli, rešili zajednički svojstveni problem i tako dobili potpunu klasifikaciju stanja za $\hat{H}_0$:

$$\{\mid n\lambda \rangle \mid \lambda = 1, 2, \ldots, d_n; \forall n\} \tag{10.3.2a}$$

i odgovarajući spektar

$$\{E_n^0 \mid \forall n\}. \tag{10.3.2b}$$

(Radi jednostavnosti pretpostavljamo da $\hat{H}_0$ ima čisto diskretan spektar (10.3.2b), sa d_n kao multiplicitetom nivoa E_n^0.) Dakle, $\hat{H}_0 \mid n\lambda \rangle = E_n^0 \mid n\lambda \rangle$, $\forall \lambda, \forall n$.

U početnom trenutku t_0 imamo proizvoljno *zadato početno stanje* $\mid \psi(t_0) \rangle$. U kasnijem trenutku $t > t_0$ imaćemo stanje $\mid \psi(t) \rangle$ *koje treba izračunati*:

$$\mid \psi(t) \rangle = \hat{U}(t - t_0, t_0) \mid \psi(t_0) \rangle, \tag{10.3.3}$$

gde je $\hat{U}$ evolucioni operator perturbisanog hamiltonijana $\hat{H}(t)$.

Program teorije vremenski zavisne perturbacije sastoji se u pisanju $\mid \psi(t) \rangle$ kao stepenog reda po $\hat{H}'(t)$:

$$\boxed{\mid \psi(t) \rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \mid \psi^{(p)}(t) \rangle} \tag{10.3.4}$$

i u izračunavanju pojedinih članova $\mid \psi^{(p)}(t) \rangle$.

Dakle, i u teoriji stacionarne perturbacije i u teoriji vremenski zavisne perturbacije entitete vezane za perturbisani hamiltonijan razvijamo u stepeni red po maloj perturbaciji. Ali, dok u stacionarnoj teoriji ovako izračunavamo svojstveni problem (nivoe i stanja) samog perturbisanog hamiltonijana, u vremenski zavisnoj teoriji na ovaj način izračunavamo stanje kvantnog sistema $\mid \psi(t) \rangle$, u koje evoluira proizvoljno početno stanje $\mid \psi(t_0) \rangle$ (dakle, ni $\mid \psi(t_0) \rangle$ ni $\mid \psi(t) \rangle$ ne moraju biti svojstvena stanja perturbisanog hamiltonijana $\hat{H}(t)$!).

10.3.2 Pojedine popravke evolucionog operatora

Na osnovu (10.3.3), možemo (10.3.4) rešavati u integralnom vidu, tj. preko evolucionog operatora $\hat{U}$. Onda se (10.3.4) svodi na

$$\boxed{\hat{U}(t-t_0,t_0) = \sum_{p=0}^{\infty} \hat{U}^{(p)}(t-t_0,t_0)}, \qquad (10.3.5)$$

pri čemu $\mid \psi^{(p)}(t) \rangle = \hat{U}^{(p)}(t-t_0,t_0) \mid \psi(t_0) \rangle, \forall p$. Kao što smo videli u odeljku u kome smo proučavali interakcionu sliku zakona kretanja, evolucioni operator se može faktorisati (uporediti (3.4.5)):

$$\hat{U}(t-t_0,t_0) = \hat{U}_0(t-t_0,t_0)\hat{U}'(t-t_0,t_0), \qquad (10.3.6)$$

gde je $\hat{U}_0$ evolucioni operator neperturbisanog hamiltonijana $\hat{H}_0$. Kao što smo videli (uporediti (3.4.6)), unitarni operator $\hat{U}'$, koji je definisan sa (10.3.6), odgovara perturbaciji $\hat{H}'$ u tom smislu da ih povezuje standardna diferencijalna jednačina

$$\imath\hbar \frac{\mathrm{d}\hat{U}'(t-t_0,t_0)}{\mathrm{d}t} = \hat{H}_I'(t)\hat{U}'(t-t_0,t_0). \qquad (10.3.7a)$$

Ali, pošto u (10.3.7a) perturbacija ulazi u interakcionoj slici,

$$\hat{H}_I'(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \hat{U}_0^\dagger(t-t_0,t_0)\hat{H}'(t)\hat{U}_0(t-t_0,t_0), \qquad (10.3.7b)$$

operator $\hat{U}_0$ je implicitno prisutan u (10.3.7a) i ova jednačina nije potpuno nezavisna od neperturbisanog problema. Inače $\hat{H}'$ nije sam po sebi nikakav hamiltonijan (za razliku od $\hat{H}_0$) i stoga (10.3.7a) ne znači da je $\hat{U}'$ evolucioni operator perturbacije $\hat{H}'$; veza koju (10.3.7a) uspostavlja između $\hat{U}'$ i $\hat{H}'$ je samo formalna (za razliku od fizičke povezanosti $\hat{H}$ i $\hat{U}$ ili $\hat{H}_0$ i $\hat{U}_0$).

Diferencijalna jednačina prvog reda (10.3.7a) sa početnim uslovom $\hat{U}'(0,t_0) = \hat{I}$ (koji sledi iz (10.3.6)) očigledno je ekvivalentna integralnoj jednačini

$$\hat{U}'(t-t_0,t_0) = \hat{I} - \frac{\imath}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}_I'(t_1)\hat{U}'(t_1-t_0,t_0)\,\mathrm{d}t_1. \qquad (10.3.8)$$

Razvijanje evolucionog operatora $\hat{U}$ u red (10.3.5) svodi se preko (10.3.6) na razvijanje $\hat{U}'$ u red:

$$\hat{U}'(t-t_0,t_0) = \sum_{p=0}^{\infty} \hat{U}'^{(p)}(t-t_0,t_0). \qquad (10.3.9)$$

Zamena (10.3.9) u (10.3.8) daje (izjednačavajući članove istog reda po $\hat{H}'$ s leve strane i s desne strane):

$$\hat{U}'^{(0)}(t-t_0,t_0) = \hat{I}, \qquad (10.3.10a)$$

$$\hat{U}'^{(1)}(t-t_0,t_0) = \frac{1}{\imath\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}_I'(t_1)\,\mathrm{d}t_1, \qquad (10.3.10b)$$

$$\hat{U}'^{(2)}(t-t_0,t_0) = \frac{1}{(\imath\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \int_{t_0}^{t_2} \mathrm{d}t_1 \hat{H}_I'(t_2)\hat{H}_I'(t_1), \qquad (10.3.10c)$$

tj. za $p = 1, 2, \ldots$:

$$\hat{U}'^{(p)}(t-t_0,t_0) = \frac{1}{(\imath\hbar)^p}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_p \int_{t_0}^{t_p} \mathrm{d}t_{p-1}\ldots\int_{t_0}^{t_2} \mathrm{d}t_1 \hat{H}'_I(t_p)\ldots\hat{H}'_I(t_1). \tag{10.3.11}$$

Kad se, najzad, vratimo na pravi evolucioni operator sistema $\hat{U}$, s jedne strane ga pišemo u vidu reda (10.3.5), a s druge strane

$$\hat{U} = \hat{U}_0\hat{U}' = \hat{U}_0\sum_{p=0}^{\infty}\hat{U}'^{(p)}. \tag{10.3.12}$$

Stoga, $\hat{U}^{(p)} = \hat{U}_0\hat{U}'^{(p)}$, $p = 0, 1, 2, \ldots$. To znači

$$\boxed{\hat{U}^{(0)}(t-t_0,t_0) = \hat{U}_0(t-t_0,t_0)}, \tag{10.3.13a}$$

$$\boxed{\hat{U}^{(1)}(t-t_0,t_0) = \tfrac{1}{\imath\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1\, \hat{U}_0(t-t_1,t_1)\hat{H}'_I(t_1)\hat{U}_0(t_1-t_0,t_0)}, \tag{10.3.13b}$$

$$\boxed{\hat{U}^{(2)}(t-t_0,t_0) = \tfrac{1}{(\imath\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \int_{t_0}^{t_2} \mathrm{d}t_1\, \hat{U}_0(t-t_2,t_2)\hat{H}'_I(t_2)\hat{U}_0(t_2-t_1,t_1)\hat{H}'_I(t_1)\hat{U}(t_1-t_0,t_0)}, \tag{10.3.13c}$$

pa je opšta formula za $p = 1, 2, \ldots$:

$$\hat{U}^{(p)}(t-t_0,t_0) = \frac{1}{(\imath\hbar)^p}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_p \int_{t_0}^{t_p} \mathrm{d}t_{p-1}\cdots\int_{t_0}^{t_2} \mathrm{d}t_1 \;\times \tag{10.3.13d}$$
$$\times\, \hat{U}_0(t-t_p,t_p)\hat{H}'_I(t_p)\hat{U}_0(t_p-t_{p-1},t_{p-1})\hat{H}'_I(t_{p-1})\cdots\hat{U}_0(t_2-t_1,t_1)\hat{H}'_I(t_1)\hat{U}(t_1-t_0,t_0),$$

Zadatak 10.3.1 Objasniti kako je došlo do zavisnosti od početnih trenutaka i intervala kao što je napisano u (10.3.13d).

U ekvivalentnom *diferencijalnom prilazu* stanje $\mid\psi(t)\,\rangle$ se reprezentuje u neperturbisanom bazisu (10.3.2a):

$$\mid\psi(t)\,\rangle = \sum_n\sum_{\lambda=1}^{d_n} a_{n\lambda}(t)\mid n\lambda\,\rangle \tag{10.3.14}$$

i brojna kolona koja reprezentuje $\mid\psi(t)\,\rangle$ piše se u interakcionoj slici.

Zadatak 10.3.2 Pokazati da elementi ove brojne kolone glase

$$b_{n\lambda}(t) = a_{n\lambda}(t)e^{\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_n^0}. \tag{10.3.15}$$

Radi jednostavnijeg pisanja pretpostavićemo da $\hat{H}_0$ ima prost spektar ($d_n = 1,\ \forall n$).

Zadatak 10.3.3 Pokazati da pomenuta brojna kolona zadovoljava zakon kretanja

$$\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} b_1(t)\\ b_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12}e^{\imath\omega_{12}(t-t_0)} & \ldots\\ H'_{21}e^{-\imath\omega_{12}(t-t_0)} & H'_{22} & \ldots\\ \vdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1(t)\\ b_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix}, \tag{10.3.16a}$$

gde su

$$\omega_{nn'} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{\hbar}(E_n^0 - E_{n'}^0), \tag{10.3.16b}$$

a $H'_{nn'} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \langle n\mid\hat{H}'(t)\mid n'\,\rangle$.

Zadatak 10.3.4 Pokazati da razvijanje stanja u red po $\hat{H}'$ daje (pišemo brojne kolone i matrice pojednostavljeno):

$$(\, b_n^0(t)\,) = (\, a_n(t_0)\,)\,, \tag{10.3.17a}$$

gde su a_n koeficijenti razvoja početnog stanja

$$|\,\psi(t_0)\,\rangle = \sum_n a_n(t_0)\,|\,n\,\rangle, \tag{10.3.18}$$

i da za $p = 1, 2, \ldots$ važi:

$$\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,(\,b_n^{(p)}(t)\,) = (\,H'_{nn'}e^{\imath\omega_{nn'}(t-t_0)}\,)\,(\,b_{n'}^{(p-1)}(t)\,)\,. \tag{10.3.17b}$$

10.3.3 Izračunavanje verovatnoća prelaza pomoću dijagrama

Opet ćemo radi jednostavnijeg pisanja zanemariti eventualnu degeneraciju neperturbisanih nivoa E_n^0, tj. pisaćemo neperturbisana stanja s jednim kvantnim brojem: $|\,n\,\rangle$.

Pretpostavimo da je u početnom trenutku t_0 naš kvantni sistem bio u neperturbisanom stanju $|\,\overline{n}\,\rangle$. Neka onda perturbacija $\hat{H}'(t)$ deluje u intervalu dužine $t - t_0$. Pitamo se kolika je verovatnoća da pri merenju opservable $\hat{H}_0$ sistem pronađemo u proizvoljno odabranom neperturbisanom stanju $|\,n\,\rangle$.

Očigledno, odgovor daje *verovatnoća prelaza*

$$v(\overline{n}, t_0 \to n, t) = |\langle n\,|\,\hat{U}(t-t_0, t_0)\,|\,\overline{n}\,\rangle|^2. \tag{10.3.19}$$

Po izloženoj metodi teorije vremenski zavisne perturbacije, evolucioni operator razvijamo u red po $\hat{H}'$ i tako dobijamo verovatnoću prelaza u pojedinim aproksimacijama $v^{[m]}$, $m = 0, 1, 2, \ldots$. Za $m \geq 1$:

$$\boxed{v^{[m]} = v^{[0]} + \textstyle\sum_{p=1}^{m} v^{(p)}}. \tag{10.3.20}$$

Nulta aproksimacija $v^{[0]}$ jednaka je nultoj približnosti desne strane od (10.3.19):

$$\boxed{v^{[0]} = \delta_{\overline{n}n}} \tag{10.3.21}$$

(jer $\hat{U}^{(0)} = \hat{U}_0$). Ostale aproksimacije $v^{[m]}$, $m = 0, 1, 2, \ldots$ dobijaju se dodavanjem odgovarajućih popravki $\sum_{p=1}^{m} v^{(p)}$, a pojedine korekcije $v^{(p)}$ su jednake odgovarajućim popravkama desne strane od (10.3.19).

Na primer, usled identiteta

$$|\langle n\,|\,\textstyle\sum_{p=0}^{\infty}\hat{U}^{(p)}(t-t_0, t_0)\,|\,\overline{n}\,\rangle|^2 = \displaystyle\sum_{p=0}^{\infty}\sum_{p'=0}^{\infty}\langle n\,|\,\hat{U}^{(p)}\,|\,\overline{n}\,\rangle\langle n\,|\,\hat{U}^{(p')}\,|\,\overline{n}\,\rangle^*, \tag{10.3.22}$$

prva korekcija verovatnoće prelaza glasi

$$v^{(1)} = 2\mathrm{Re}\,(\langle n\,|\,\hat{U}^{(1)}\,|\,\overline{n}\,\rangle\langle n\,|\,\hat{U}^{(0)}\,|\,\overline{n}\,\rangle^*). \tag{10.3.23}$$

Zbog $\hat{U}^{(0)} = \hat{U}_0$ i vida od $\hat{U}^{(1)}$ datog sa (10.3.13b), možemo (10.3.23) eksplicitno pisati na sledeći način:

$$v^{(1)} = \delta_{nn'} \frac{2}{\hbar} \mathrm{Re}\,\Big(- \imath e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_{\overline{n}}} \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_1)E_n} \langle n \mid \hat{H}'(t_1) \mid \overline{n} \rangle e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t_1-t_0)E_{\overline{n}}} \Big). \qquad (10.3.24)$$

Što se tiče druge popravke $v^{(2)}$, iz (10.3.22) sledi

$$v^{(2)} = 2\mathrm{Re}\,(\langle n \mid \hat{U}^{(2)} \mid \overline{n} \rangle \langle n \mid \hat{U}^{(0)} \mid \overline{n} \rangle^*) + \left|\langle n \mid \hat{U}^{(1)} \mid \overline{n} \rangle\right|^2, \qquad (10.3.25)$$

što opet pomoću (10.3.13c) daje (uz sumiranje po neperturbisanom bazisu):

$$\begin{aligned} v^{(2)} &= \delta_{nn'} \frac{2}{\hbar^2} \mathrm{Re}\,\Big(\frac{1}{\imath^2} e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_0)E_{\overline{n}}} \sum_{n_1} \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \int_{t_0}^{t_2} \mathrm{d}t_1 \times \\ &\quad \times e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_2)E_n} \langle n \mid \hat{H}'(t_2) \mid n_1 \rangle e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t_2-t_1)E_{n_1}} \langle n_1 \mid \hat{H}'(t_1) \mid \overline{n} \rangle e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t_1-t_0)E_{\overline{n}}} \Big) + \\ &+ \frac{1}{\hbar^2} \Big| \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_1)E_n} \langle n \mid \hat{H}'(t_1) \mid \overline{n} \rangle e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t_1-t_0)E_{\overline{n}}} \Big|^2. \end{aligned} \qquad (10.3.26)$$

Lako se vidi da proizvoljna popravka glasi:

$$\boxed{v^{(2q+1)} = \sum_{r=0}^{q} 2\mathrm{Re}\,(\langle n \mid \hat{U}^{(2q+1-r)} \mid \overline{n} \rangle \langle n \mid \hat{U}^{(r)} \mid \overline{n} \rangle^*)}, \qquad (10.3.27a)$$

ako je neparnog reda, tj. ako je $p = 2q + 1$, a

$$\boxed{v^{(2q)} = \sum_{r=0}^{q-1} 2\mathrm{Re}\,(\langle n \mid \hat{U}^{(2q-r)} \mid \overline{n} \rangle \langle n \mid \hat{U}^{(r)} \mid \overline{n} \rangle^*)}, \qquad (10.3.27b)$$

ako je parnog reda, tj. ako je $p = 2q$. Pri tome, za matrične elemente korekcijâ evolucionog operatora $\hat{U}$ imamo:

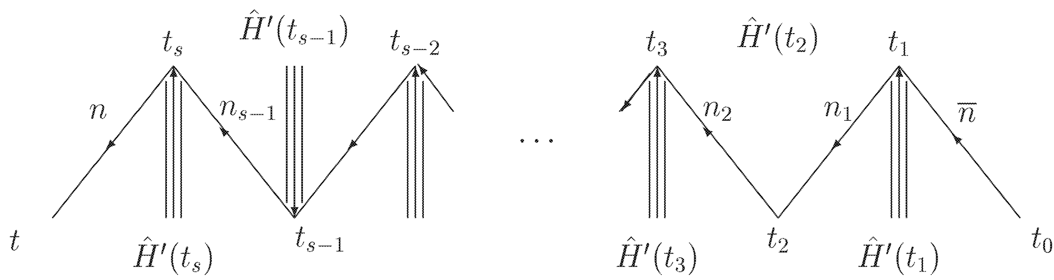
$$\boxed{\begin{aligned} \langle n \mid \hat{U}^{(s)} \mid \overline{n} \rangle &= \tfrac{1}{(\imath\hbar)^s} \sum_{n_1} \ldots \sum_{n_{s-1}} \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_s \int_{t_0}^{t_s} \mathrm{d}t_{s-1} \ldots \int_{t_0}^{t_2} \mathrm{d}t_1 \times \\ &\times\ e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t-t_s)E_n} \langle n \mid \hat{H}'(t_s) \mid n_{s-1} \rangle e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t_s-t_{s-1})E_{n_{s-1}}} \langle n_{s-1} \mid \hat{H}'(t_{s-1}) \mid n_{s-2} \rangle \cdots \\ &\times\ \cdots e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t_2-t_1)E_{n_1}} \langle n_1 \mid \hat{H}'(t_1) \mid \overline{n} \rangle e^{-\frac{\imath}{\hbar}(t_1-t_0)E_{\overline{n}}} \end{aligned}}, \qquad (10.3.28)$$

gde svaka od suma prelazi celi neperturbisani bazis.

Da bi se lako upamtio na prvi pogled komplikovani algoritam izračunavanja matričnog elementa $\langle n \mid \hat{U}^{(s)} \mid \overline{n} \rangle$ napisan u (10.3.28), pogodno je koristiti se mnemotehničkim *dijagramima* kao na Crtežu C 10.4.

Pod uslovom da se ne smetne s uma da se radi samo o grafičkom pomagalu, čitalac se može koristiti i žargonom koji obično prati čitanje dijagrama na Crtežu C 10.4, i to s desna na levo: sistem se od trenutka t_0 do t_1 propagira po hamiltonijanu $\hat{H}_0$, i to u početnom stacionarnom stanju $|\,\overline{n}\rangle$; u trenutku t_1 pod uticajem perturbacije sistem prelazi u intermedijerno stacionarno stanje $\mid n_1 \rangle$ i ono propagira od t_1 do t_2, itd. Ne treba zaboraviti ni to da su samo t_0, $\overline{n}$ i n, t fiksirani; po svim ostalim kvantnim brojevima se sumira i po svim ostalim trenucima se integriše.

Zadatak 10.3.5 Izvesti (10.3.21), (10.3.24) i (10.3.26) u diferencijalnom prilazu.



Slika 10.4: **Dijagrami izraza** $\langle n \mid \hat{U}^{(s)} \mid \overline{n} \rangle$.

Vredno je zapaziti da je verovatnoća prelaza u različito stanje $n \neq \overline{n}$ veća od nule tek u drugoj aproksimaciji; drugim rečima, ova verovatnoća je bar drugog reda malosti. U ovom slučaju imamo

$$\boxed{v^{[2]} = v^{(2)} = \tfrac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 e^{-\frac{\imath}{\hbar}(E_{\overline{n}} - E_n)t_1} \langle n \mid \hat{H}'(t_1) \mid \overline{n} \rangle \right|^2} \tag{10.3.29}$$

(fazne faktore $e^{-\frac{\imath}{\hbar}tE_{\overline{n}}}$ i $e^{-\frac{\imath}{\hbar}tE_n}$ smo izvukli ispred integrala i tu su otpali usled uzimanja modula).

Zadatak 10.3.6 Pokazati da je u drugoj aproksimaciji verovatnoća prelaza $\overline{n} \to n$ jednaka verovatnoći prelaza $n \to \overline{n}$. Kontrastirati ovaj zaključak sa mikroreverzibilnošću (videti § 8.4.7).

U literaturi se često $v^{[2]}$ naziva verovatnoća prelaza prvog reda, jer se izračunava iz $\hat{U}^{(q=1)}$.

10.3.4 Fermi-jevo zlatno pravilo

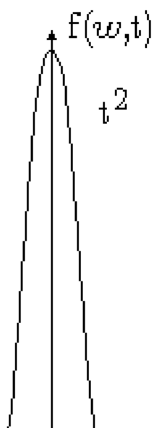
Od najveće praktične važnosti je verovatnoća prelaza u najnižoj nenultoj približnosti, tj. $v^{[2]}$ dato sa (10.3.29). Doradićemo ovaj izraz pod osnovnom pretpostavkom da je perturbacija nezavisna od vremena. Formulu pod nazivom iz naslova paragrafa izvešćemo za slučaj kada su svi energetski nivoi diskretni, a oko nivoa E_n ($\mid n \rangle$ je krajnje stanje u prelazu) imamo veliku gustinu nivoa.

Definišući $\omega_{n\overline{n}} \stackrel{\mathrm{def}}{=} (E_n - E_{\overline{n}})/\hbar$, pišući $\omega_{n\overline{n}}$ kao ω i stavljajući $t_0 = 0$ u (10.3.29), u oba slučaja dobija se izraz:

$$v^{[2]} = \frac{1}{\hbar^2} |\langle n \mid \hat{H}' \mid \overline{n} \rangle|^2 | \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 e^{\imath\omega t_1} |^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle n \mid \hat{H}' \mid \overline{n} \rangle|^2 f(\omega, t), \tag{10.3.30a}$$

gde je

$$f(\omega, t) = \frac{2}{\omega^2}(1 - \cos\omega t). \tag{10.3.30b}$$



Funkcija $f(\omega, t)$ u zavisnosti od ω prikazana je na Crtežu C 10.5. Simetričnost i nule funkcije se odmah vide iz (10.3.30b), a iznos maksimuma proizlazi iz

$$f(\omega, t) \sim t^2 + 0(\omega^2), \; \omega \to +0, \tag{10.3.31}$$

što se dobije kad se $\cos\omega t$ razvije u red oko $\omega = 0$ ($O(\omega^2)$ je sabirak reda veličine [10.3.1] ω^2). Može se pokazati da se za velike vrednosti parametra t funkcija $f(\omega, t)$ ponaša kao delta funkcija[10.3.2]:

$$f(\omega, t) \sim 2\pi t\delta(\omega), \; t \to \infty \qquad (10.3.32)$$

Zbog velike gustine nivoa oko E_n (slučaj (i)) ili zbog neprekidnosti nivoa oko E_n (slučaj (ii)) upoređenje sa eksperimentom je moguće samo ako izračunamo verovatnoću prelaza ne tačno u neko stanje $\mid n\,\rangle$, već u neku okolinu stanja $\mid n\,\rangle$, recimo u energetski interval I_E. Znači, izračunavamo:

$$v^{[2]}(\overline{n}, 0 \to I_E, n, t) = \sum_{I_E} \frac{1}{\hbar^2} \left|\langle n \mid \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle\right|^2 f(\omega, t). \qquad (10.3.33)$$

Sa sume se prelazi na integral (kao što se to često čini u teorijskoj fizici) na sledeći način: interval I_E se razbije na sumu "malih" podintervala ΔI ("velika" suma). U svakom podintervalu ΔI ima više sabiraka ("mala" suma), ali tu su sabirci približno jednaki, te se "mala" suma zameni jednim sabirkom pomnoženim brojem sabiraka u podintervalu. Ovaj broj je očigledno jednak *gustini nivoa*, $\rho(E)$ oko E pomnoženoj sa dužinom podintervala ΔE (ovde se koristimo "velikom" gustinom nivoa). "Velika" suma se prepisuje (približno) kao integral, a ΔE se piše kao dE. Tako (10.3.33) postaje

$$\begin{aligned} v^{[2]}(\overline{n}, 0 \to I_E, n, t) &= \int_{I_E} \frac{1}{\hbar^2} \left|\langle n \mid \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle\right|^2 f(\omega, t)\rho(E)\,\mathrm{d}E \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_{I_E} \left|\langle n \mid \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle\right|^2 f(\omega, t)\rho(E)\,\mathrm{d}\omega, \end{aligned} \qquad (10.3.34)$$

jer je $dE = \hbar d\omega$, a $\rho(E)$ je preko $E = E_{\overline{n}} + \hbar\omega$ funkcija od ω.

Naša sledeća pretpostavka[10.3.3] sastojaće se u tome da je I_E u stvari sa eksperimentalnog gledišta infinitezimalni interval $(E_n - \frac{1}{2}\epsilon, E_n + \frac{1}{2}\epsilon)$, ali da je istovremeno ovaj interval mnogo veći od jedne periode od $f(\omega, t)$ (uporediti Crtež C 10.5):

$$\epsilon \gg \frac{2\pi\hbar}{t}, \qquad (10.3.35)$$

tako da integral $\int_{I_E} d\omega$ možemo približno zameniti integralom po celoj realnoj osi $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega$. Ako nakon ove zamene u (10.3.34) iskoristimo (10.3.32), dolazimo do rezultata:

$$\boxed{v^{[2]}(\overline{n}, 0 \to (E_n - \tfrac{1}{2}\epsilon, E_n + \tfrac{1}{2}\epsilon) \text{ oko } \mid n\,\rangle, t) = \tfrac{2\pi t}{\hbar} \left|\langle n \mid \hat{H}' \mid \overline{n}\,\rangle\right|^2 \rho(E)}. \qquad (10.3.36)$$

[10.3.1] engleski: *order of magnitude*

[10.3.2] Može se izračunati da $\int_{-\infty}^{\infty} f(\omega, t)\frac{d\omega}{2\pi t} = 1$. Po potrebi videti detaljnije o delta funkcijama u Dodatku A.II odličnog udžbenika: A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Vol. I, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1969.

[10.3.3] Obratiti pažnju na pretpostavke pod kojima se jedna formula izvodi! Formula se može primeniti samo na slučaj koji zadovoljava sve pretpostavke izvođenja!

Zbog korisnosti ove formule u raznim primenama (na primer u Fermi-jevoj teoriji β-zračenja; u rasejanju u Coulomb-ovom polju itd.), ova formula je poznata pod specijalnim nazivom *Fermi-jevo zlatno pravilo*.

Pošto u (10.3.36) $v^{[2]}$ linearno zavisi od vremena, često se u literaturi umesto $v^{[2]}$ daje njena vremenska gustina $v^{[2]}/t$.

Obratiti pažnju da oštri maksimum funkcije $f(\omega, t)$ leži u $\omega \stackrel{\mathrm{def}}{=} \omega_{n\overline{n}}$ (uporediti Crtež C 10.5), što znači da važi:

$$E_n = E_{\overline{n}}, \tag{10.3.37}$$

tj. radi se o prelazu u drugo stanje $\mid n\,\rangle \neq \mid n\,\rangle$, ali koje ima istu energiju (održanje energije pri prelazu).

Najzad, treba još imati u vidu da iako dužina vremenskog intervala t (koliko traje proces koji dovodi do prelaza) mora biti dovoljno velika da važi (10.3.35), ona mora biti istovremeno i dovoljno mala da važi druga aproksimacija za pralaz, tj. da je desna strana od (10.3.36) mnogo manja od 1.

10.4 Varijacioni račun i metod samousaglašenog polja

Poći ćemo od osnovnih ideja na kojima se zasniva varijacioni račun u kvantnoj mehanici. Specijalnu pažnju ćemo obratiti na osnovno i na prvo pobuđeno stanje. Posle toga ćemo do kraja odeljka ograničiti proučavanje na Slater-ove determinante kao probne funkcije varijacionog računa. Izvešćemo njihove jednočestične i dvočestične (redukovane) statističke operatore, jer su od Slater-ovih determinanti jedino oni relevantni za dinamički problem. Na kraju ćemo izvesti tzv. Hartree-Fockove jednakosti ili metod samousaglašenog polja, što u stvari znači iznalaženje stacionarne Slater-ove determinante za opisivanje osnovnog stanja. Mi ćemo se koristiti umesto samim Slater-ovim determinantama njima ekvivalentnim projektorima (jednočestičnim statističkim operatorima) u jednočestičnom prostoru. Uz pomoć "usrednjenog potencijala" formulisaćemo i rešićemo ceo varijacioni problem u prostoru stanja jednog fermiona. Fizički smisao toga je ne uzimanje u obzir nikakvih korelacija među fermionima osim onih koje nameće Pauli-jev princip (koje su prisutne u Slater-ovoj determinanti).

10.4.1 Varijaciona reformulacija svojstvenog problema hamiltonijana

Počećemo sa dokazivanjem jednog teorema od osnovnog značaja za varijacioni račun u kvantnoj mehanici.

Teorem 10.4.1 *Posmatramo očekivanu vrednost hamiltonijana*

$$\boxed{E(\psi) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{\langle\,\psi\,|\hat{H}|\,\psi\,\rangle}{\langle\,\psi\mid\psi\rangle}}, \tag{10.4.1}$$

kao funkcional na skupu svih nenultih vektora $\mid \psi\,\rangle \in \mathcal{H}$ *prostora stanja datog kvantnog sistema. U odnosu na sve varijacije* $\delta\psi$ *vektorâ* $\mid\psi\,\rangle$, $E(\psi)$ *ima* stacionarnu tačku, *tj.*

$$\boxed{\delta E(\psi) = 0}, \tag{10.4.2}$$

ako i samo ako je $|\,\psi\,\rangle$ *svojstveni vektor od* $\hat{H}$ *i onda je* $E(\psi)$ *upravo odgovarajuća svojstvena vrednost:*

$$\hat{H}\,|\,\psi\,\rangle = E(\psi)\,|\,\psi\,\rangle. \tag{10.4.3}$$

Dokaz: Napišimo (10.4.1) u vidu $\langle\,\psi\,|\,\psi\rangle E(\psi) = \langle\psi\,|\,\hat{H}\,|\,\psi\rangle$. Prva varijacija ove jednakosti daje $\delta(\langle\,\psi\,|\,\psi\rangle)E(\psi)+\langle\,\psi\,|\,\psi\rangle\delta E(\psi) = \delta(\langle\psi\,|\,\hat{H}\,|\,\psi\,\rangle) \Rightarrow (\langle\,\delta\psi\,|\,\psi\rangle + \langle\,\psi\,|\,\delta\psi\rangle)E(\psi) + \langle\,\psi\,|\,\psi\rangle\delta E(\psi) = \langle\delta\psi\,|\,\hat{H}\,|\,\psi\,\rangle + \langle\psi\,|\,\hat{H}\,|\,\delta\psi\,\rangle$ $\Rightarrow \langle\,\psi\,|\,\psi\rangle\delta E(\psi) = \langle\delta\psi\,|\,(\hat{H}-E(\psi))\,|\,\psi\,\rangle + \langle\psi\,|\,(\hat{H}-E(\psi))\,|\,\delta\psi\,\rangle$. Pošto je $0 < \langle\,\psi\,|\,\psi\rangle < \infty$, uslov $\delta E(\psi) = 0$ je ekvivalentan uslovu

$$\langle\delta\psi\,|\,(\hat{H}-E(\psi))\,|\,\psi\,\rangle + \langle\psi\,|\,(\hat{H}-E(\psi))\,|\,\delta\psi\,\rangle = 0. \tag{10.4.4}$$

Pošto (10.4.4) važi sa sve moguće $\delta\psi$, možemo u (10.4.4) da $\delta\psi$ zamenimo sa $\imath\delta\psi$, a to daje $-\imath\langle\delta\psi\,|\,(\hat{H}-E(\psi))\,|\,\psi\,\rangle + \imath\langle\psi\,|\,(\hat{H}-E(\psi))\,|\,\delta\psi\,\rangle = 0$ i imaginarnu jedinicu možemo izbaciti. Oduzimanje od (10.4.4) i sabiranje sa (10.4.4) onda daje sledeće dve jednakosti (koje su zajedno očigledno ekvivalentne sa (10.4.4)):

$$\langle\delta\psi\,|\,(\hat{H}-E(\psi))\,|\,\psi\,\rangle = 0 = \langle\psi\,|\,(\hat{H}-E(\psi))\,|\,\delta\psi\,\rangle. \tag{10.4.5}$$

Zbog arbitrernosti vektora $\delta\psi$ (samo mu norma mora biti "mala"), (10.4.5) je očigledno ekvivalentno sa

$$(\hat{H}-E(\psi))\,|\,\psi\,\rangle = 0, \qquad 0 = \langle\psi\,|\,(\hat{H}-E(\psi)). \tag{10.4.6a,b}$$

Pošto je (10.4.6b) bra-jednakost od (10.4.6a) (tu se koristimo hermitskom prirodom oporatora $\hat{H}$ i realnošću očekivane vrednosti $E(\psi)$), konačna jednakost ekvivalentna sa (10.4.2) je (10.4.3).
Kada koristimo (10.4.3) kao dovoljni uslov za (10.4.2), ne moramo posebno zahtevati da se svojstvena vrednost podudara sa $E(\psi)$, jer to desna strana od (10.4.1) daje automatski. *Q. E. D.*

Sa gledišta varijacionog računa, treba uočiti sledeće pojmove u gornjem rezultatu: vektor $|\,\psi\rangle$ sa kojim se u (10.4.1) izračunava $E(\psi)$ naziva se *probnim vektorom*[10.4.1]; *skup svih probnih vektora* je ceo $\mathcal{H}$ (sa izuzetkom nultog vektora; to je skup $\mathcal{H}\ominus\{0\}$); *skup svih varijacija* $\delta\psi$ u odnosu na koje važi (10.4.2), tj. u odnosu na koje imamo stacionarnu tačku[10.4.2] (zapravo stacionarni vektor $|\,\psi\,\rangle$) je bez restrikcija cela okolina nule u $\mathcal{H}$, tj. imamo tzv. bezuslovnu stacionarnu tačku.

Varijacioni račun, kao i perturbacioni, stupa na scenu kada ne umemo da rešimo svojstveni problem hamiltonijana. Onda, naravno, ne umemo da rešimo ni njegovu ekvivalentnu formu (10.4.2). Tada se umesto $\mathcal{H}\ominus\{0\}$ uzima neki određeni podskup $S\in\mathcal{H}\ominus\{0\}$ kao skup svih probnih vektora. Skup S je obično određen s jedne strane čisto računskim mogućnostima, a s druge strane vidom probnih vektora za koje se pretpostavlja (ili zna) da su relevantni za opisivanje stanja sistema (tj. da su na neki način usklađeni sa dinamičkom strukturom sistema).

Ograničenje na S izaziva *a fortiori* i *ograničenje skupa svih varijacija.* Naime, varijacija $\delta\psi = \psi' - \psi$ mora biti takva da $\psi,\ \psi' \in S$.

U svojoj najgrubljoj i, možda, najčešće korišćenoj formi varijacioni račun bazira na očekivanju da će stacionarne tačke u S približno reprodukovati svojstvene vektore od $\hat{H}$, a očekivane vrednosti $E(\psi)$ energetske nivoe. Približnost će biti tim bolja što je S obuhvatniji skup (što je bliži skupu $\mathcal{H}\ominus\{0\}$ i (ovo je u praksi najvažnije) što je bolje pogođen vid probnih vektora.

[10.4.1] Engleski: *trial vector*; čitatl: trajl vekte.

[10.4.2] Termin "stacionarna" tačka u varijacionom računu nije u direktnoj vezi sa "stacionarnim" rešenjem zakona kretanja, osim u slučaju sadržaja Teorema T 10.4.1.

10.4.2 * Ocena greške

U perturbacionom računu ako je perturbacija $\hat{H}'$ mala, svaka korekcija je znatno manja od prethodne i čovek ima neki osećaj koliko je dobra aproksimacija, iako ne postoji precizna ocena greške. Varijacioni račun veštački iseca pomenuti skup S probnih vektora iz $\mathcal{H} \ominus \{0\}$, a jedino fizičko opravdanje za to je, kao što smo rekli, relevantan vid samih probnih vektora $|\,\psi\,\rangle \in S$, koji može (i ne mora) biti dobro pogođen.

Postoji jedan apsolutni iskaz (nezavisan od skupa S) koji daje neku *ocenu greške* pri aproksimiranju egzaktnog nivoa hamiltonijana $\hat{H}$ srednjom vrednošću $E(\psi)$ iz (10.4.1), ako $\hat{H}$ ima čisto diskretan spektar.

Lema 10.4.1 *Za svaki $0 \neq |\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}$ postoji bar jedan egzaktni nivo E_{n_0} hamiltonijana $\hat{H}$ u intervalu*

$$[E(\psi) - \Delta E, E(\psi) + \Delta E] \tag{10.4.7}$$

oko očekivane vrednosti $E(\psi)$. Ovde je $\Delta E \stackrel{\mathrm{def}}{=} \Delta H \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sqrt{\langle \psi \mid (\hat{H} - E(\psi))^2 \mid \psi \rangle}$, tj. neodređenost energije u stanju $|\,\psi\,\rangle$.

Dokaz: Sledi odmah iz dve druge leme, koje su konceptualno veoma jednostavne i dobro je imati ih na umu i inače. *Q. E. D.*

Lema 10.4.2 *Linearna devijacija od srednje vrednosti proizvoljne opservable $\hat{A}$ je u srednjem uvek nula:*

$$\langle\, (\hat{A} - \langle\, \hat{A}\,\rangle)\,\rangle = 0. \tag{10.4.8}$$

Zadatak 10.4.1 Dokazati (10.4.8) za čisto i za mešano stanje, u oba slučaja za $\hat{A}$ sa čisto diskretnim spektrom i za $\hat{A}$ koji ima i kontinualni spektar.

Zadatak 10.4.2 Pokazati da za realan broj μ za koji $\langle\, (\hat{A} - \mu)\,\rangle = 0$ nužno važi $\mu = \langle\, \hat{A}\,\rangle$. Drugim rečima, relacija (10.4.8) je karakteristična za srednju vrednost.

Lema 10.4.3 *Ako opservabla $\hat{A}$ ima čisto diskretan spektar, onda postoji bar jedna njena svojstvena vrednost a_{n_0} takva da $a_{n_0} \leq \langle\, \hat{A}\,\rangle$.*

Dokaz: Neka je kvantni sistem u čistom stanju $|\,\psi\rangle$, a neka je spektralna forma opservable $\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n$. Onda iz Leme L 10.4.2 sledi $0 = \sum_n v_n(\langle\, \hat{A}\,\rangle - a_n)$, gde je $v_n \stackrel{\mathrm{def}}{=} \|\hat{P}_n\psi\|^2$, $\forall n$. Obeležimo sa prim vrednosti od n za koje je $\langle\, \hat{A}\,\rangle \geq a_{n'}$, a sa seconde[10.4.3] vrednosti od n koje daju $a_{n''} > \langle\, \hat{A}\,\rangle$. Onda

$$\sum_{n'} v_{n'}(\langle\, \hat{A}\,\rangle - a_{n'}) = \sum_{n''} v_{n''}(a_{n''} - \langle\, \hat{A}\,\rangle) \tag{10.4.9}$$

i svaki sabirak je pozitivan. Sad učinimo *ab contrario* pretpostavku da nema ni jedne n' vrednosti indeksa. Onda desna strana od (10.4.9) mora biti nula (jer je leva nula). Pošto su po pretpostavci $a_{n''} - \langle\, \hat{A}\,\rangle > 0$, $\forall n''$, moramo imati $v_{n''} = 0$, $\forall n$, zapravo $v_n = 0$, $\forall n$ (jer nema n'-ova), a to nije moguće zbog $\langle\, \psi \mid \psi\rangle = \sum_n v_n = 1$. *Q. E. D.*

Zadatak 10.4.3 Dokazati što elegantnije simetričan iskaz iskazu Leme L 10.4.2.

Zadatak 10.4.4 Dokazati Lemu L 10.4.2 za mešano stanje.

[10.4.3] Čitati: zgond.

Dokaz: (Završetak dokaza Leme L 10.4.1.) Pošto opservabla $(\hat{H}-E(\psi))^2$ ima spektralnu formu $\sum_n(E_n - E(\psi))^2\hat{P}_n$ ako sam hamiltonijan $\hat{H}$ ima spektralni vid $\sum_n E_n\hat{P}_n$, Lema L 10.4.3 ima za posledicu da postoji nivo E_{n_0} takav da $(E_{n_0}-E(\psi))^2 \leq (\Delta E)^2 \Leftrightarrow |E_{n_0}-E(\psi)| \leq \Delta E$, a to je očigledno ekvivalentno sa (10.4.7). *Q. E. D.*

Zadatak 10.4.5 Pokazati da lema L 10.4.1 važi i za opštiji slučaj kada $\hat{H}$ ima i diskretan i kontinualan spektar, ali $E(\psi)$ leži ispod celog kontinualnog spektra, tj. za svaku neprekidnu svojstvenu vrednost E od $\hat{H}$ važi $E(\psi) \leq E$.

Dakle, neodređenost ΔE može da posluži kao (većinom veoma gruba) ocena greške za egzaktni nivo od $\hat{H}$ koji aproksimiramo sa $E(\psi)$.

Jedan prigovor na ovaj rezultat može da bude da ne znamo koji smo nivo "ulovili" u intervalu (10.4.7). Šta znači "koji" nivo? To u kvantnoj mehanici može samo da znači da ne znamo koje su vrednosti dodatnih kvantnih brojeva kojima dopunjujemo energetski nivo do potpunog skupa kvantnih brojeva (do potpune klasifikacije stanja). Na primer, možda znamo (kao što obično jeste slučaj) da svaki egzaktni nivo ima određenu vrednost ukupnog uglovnog momenta J i određenu parnost Π. Pitamo se koje su vrednosti J^{Π} "ulovljenog" nivoa. Na ovakvo pitanje odgovor daje sladeća lema.

Lema 10.4.4 *Neka hamiltonijan $\hat{H}$ ima izvesnu grupu simetrije G, tj. neka*

$$[\,\hat{U}(g), \hat{H}\,] = 0,\ \forall g \in G, \tag{10.4.10}$$

i neka je $|\,\psi\,\rangle$ vektor iz neke "fioke" $\mathcal{V}_{km}$ u odnosu na G. Onda u intervalu $[E(\psi)-\Delta E, E(\psi)+\Delta E]$ postoji bar jedan egzaktan nivo sa kvantnim brojevima k i m.

Dokaz: Pretpostavimo da je ceo prostor $\mathcal{H}$ ortogonalno dekomponovan na "fioke" po grupi simetrije G i da je $|\,\psi\,\rangle$ vektor iz "fioke" $\mathcal{V}_{km}$. Onda iz T 6.4.2 sledi (ako $G \neq \mathrm{R}(3)$, onda po analogiji) da se $\hat{H}$ redukuje u $\mathcal{V}_{km}$ i rezonovanje iz dokaza Leme L 10.4.1 važi u $\mathcal{V}_{km}$ kao da je to ceo prostor. U $\mathcal{V}_{km}$, naravno, svi nivoi od $\hat{H}$ imaju kvantne brojeve k i m. *Q. E. D.*

Drugi prigovor na ocenu greške ΔE iz Leme L 10.4.1 ili Leme L 10.4.4 može da se sastoji u tome da ΔE nije lako izračunati. Pošto $(\Delta E)^2 = \langle\,\hat{H}^2\,\rangle - E(\psi)^2$, mora se izračunati $\langle\,\hat{H}^2\,\rangle$, a to je zbog kvadriranja često znatno ozbiljniji računski problem nego izračunavanje samog broja $E(\psi) = \langle\,\hat{H}\,\rangle$.

Treći prigovor na našu ocenu greške može biti taj da ona, izgleda, nema nikakve veze sa variranjem $|\,\psi\,\rangle$ po skupu S probnih vektora i specijalno sa stacionarnim tačkama.

10.4.3 Varijaciono izračunavanje osnovnog nivoa

Kao što je čitaocu poznato, struktura realnih kvantnih sistema je takva da uvek postoji najniža svojstvena vrednost hamiltonijana, tzv. osnovni nivo E_0. Za njegovo varijaciono izračunavanje korisno je znati iskaz sledećeg teorema.

Teorem 10.4.2 *Za proizvoljni normirani vektor $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}$ srednja vrednost $E(\psi) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \langle\psi\,|\,\hat{H}\,|\,\psi\rangle$ sigurno nije ispod osnovnog nivoa E_0:*

$$E(\psi) \geq E_0. \tag{10.4.11}$$

Dokaz: Pretpostavimo opet radi jednostavnosti da hamiltonijan $\hat{H}$ ima čisto diskretan spektar, tj. spektralni vid $\hat{H} = \sum_n E_n \hat{P}_n$. Onda $E(\psi) = \sum_n v_n E_n$ ($v_n \stackrel{\text{def}}{=} ||\hat{P}_n \psi||^2$), te $E(\psi) \geq \sum_n v_n E_0$ (jer $E_n \geq E_0$, $\forall n$); dalje, $E(\psi) \geq E_0 \sum_n v_n = E_0$. *Q. E. D.*

Nažalost, ako ne znamo osnovni nivo E_0, ne znamo ni koliko je $E(\psi)$ iznad njega, samo znamo da ga majorira.

Kada se fiksira skup S probnih vektora, onda (10.4.11) znači da je $E(\psi)$, kao realna funkcija na S, ograničena odozdo, što znači da ima konačni infimum i on je takođe majoranta za E_0. Obično se S bira tako da je zatvoren na uzimanje limesa (konvergentnih nizova $| \psi_n \rangle \in S$), tako da S sadrži i vektor $| \psi_0 \rangle$, koji daje najnižu (znači najbolju) aproksimaciju $E(\psi_0)$.

Pitanje je kako pronaći $| \psi_0 \rangle$. To je tačka *apsolutnog minimuma* vrednosti $E(\psi)$ u S. Apsolutni minimum spada u lokalne minimume, a ovi spadaju u stacionarne tačke. Stoga je potreban uslov za $| \psi_0 \rangle$:

$$\boxed{\Delta E(\psi_0) = 0}, \tag{10.4.12}$$

što nas ponovo dovodi do varijacione jednakosti (10.4.2), ali ovoga puta bez oslanjanja na svojstveni problem od $\hat{H}$ u $\mathcal{H}$.

Dakle, $| \psi_0 \rangle$, koji daje apsolutni minimum, ćemo naći rešavanjem jednakosti (10.4.12). Ako ova jednakost ima samo jedno rešenje, onda je to sigurno traženo $| \psi_0 \rangle$, jer, kao što smo videli da sledi iz Teorema T 10.4.2, apsolutni minimum u S mora da postoji. Ako (10.4.12) ima više rešenja, onda pre svega moramo odvojiti lokalne minimume od eventualnih drugih stacionarnih tačaka (lokalnih maksimuma i prevojnih tačaka). Lokalne minimume prepoznajemo po tome što je druga varijacija pozitivna:

$$\delta^2(\psi) \geq 0, \tag{10.4.13}$$

bez obzira kako variramo $| \psi_0 \rangle$ (za lokalne maksimume imamo $\delta^2(\psi) \leq 0$ za sve varijacije, a za prevojne tačke pri različitom variranju imamo različit predznak). Ako imamo samo jedan lokalni minimum, onda je to apsolutni minimum $| \psi_0 \rangle$. Ako ih ima više, moramo odabrati najnižu vrednost od dotičnih $E(\psi)$.

10.4.4 * Varijaciono izračunavanje prvog pobuđenog nivoa

Prvi pobuđeni nivo E_1 hamiltonijana $\hat{H}$ se najpouzdanije može izračunati ako znamo da je svaki vektor u skupu S ortogonalan na egzaktno osnovno stanje, odnosno na osnovni potprostor $\mathcal{V}(E_0)$ ako je egzaktni osnovni nivo E_0 degenerisan. Naime, to znači $S \subseteq \mathcal{V}(E_0)^\perp$, tj. S pripada ortokomplementu svojstvenog potprostora $\mathcal{V}(E_0)$. Hamiltonijan $\hat{H}$ se redukuje u pomenutom $\mathcal{V}(E_0)^\perp$, a E_1 je (formalno) osnovni nivo u $\mathcal{V}(E_0)^\perp$ i važi sve što je rečeno u prethodnom paragrafu.

Da bismo se uverili u važenje pomenute osobine ortogonalnosti $S \subseteq \mathcal{V}(E_0)^\perp$, nije neophodno poznavati $\mathcal{V}(E_0)$. Dovoljno je znati jedan kvantni broj (ili više njih) koji ima E_0, recimo k, koji definiše potprostor ("ormar") $\mathcal{V}_k$. Onda $\mathcal{V}(E_0) \subseteq \mathcal{V}_k$ i dovoljno je uzeti $S \subseteq \mathcal{V}_k^\perp$, onda očigledno sledi $S \subseteq \mathcal{V}(E_0)^\perp$.

Ipak, često nemamo ovakav pogodan skup S, ali imamo približno osnovno stanje $| \Phi_0 \rangle$ i biramo $S \perp | \Phi_0 \rangle$. I u ovom slučaju postoji jedan opšti rezultat koji je koristan.

Lema 10.4.5 *Neka su E_0 i E_1 osnovni i prvi pobuđeni egzaktni nivo, neka su oba nedegenerisana i neka im odgovaraju (egzaktna) stanja $\mid E_0 \rangle$, odnosno $\mid E_1 \rangle$. Neka, osim toga,*

$$\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} 1 - |\langle E_0 \mid \Phi_0 \rangle|^2 \tag{10.4.14a}$$

meri veličinu promašaja približnog osnovnog stanja $\mid \Phi_0 \rangle$ u odnosu na tačno osnovno stanje $\mid E_0 \rangle$. Onda za svaki normirani vektor $\mid \psi \rangle \in S$, iz $S \perp \mid \Phi_0 \rangle$ sledi

$$E(\psi) \geq E_1 - \epsilon(E_1 - E_0). \tag{10.4.14b}$$

Dokaz: Uočimo bazis $\{\mid \chi_1 \rangle = \mid \Phi_0 \rangle, \mid \chi_2 \rangle = \mid \psi \rangle, \mid \chi_3 \rangle, \mid \chi_4 \rangle \ldots\}$ u prostoru stanja $\mathcal{H}$. Onda $1 = \langle E_0 \mid E_0 \rangle = |\langle \Phi_0 \mid E_0 \rangle|^2 + |\langle \psi_0 \mid E_0 \rangle|^2 + \sum_{n\geq 3} |\langle \chi_n \mid E_0 \rangle|^2$. Zamenjujući prvi sabirak na desnoj strani pomoću (10.4.14*a*), imamo $1 = 1 - \epsilon + |\langle \psi_0 \mid E_0 \rangle|^2 + \sum_{n\geq 3} |\langle \chi_n \mid E_0 \rangle|^2 \Rightarrow \epsilon = |\langle \psi \mid E_0 \rangle|^2 + \sum_{n\geq 3} |\langle \chi_n \mid E_0 \rangle|^2$, odakle

$$|\langle \psi \mid E_0 \rangle|^2 \leq \epsilon. \tag{10.4.15}$$

Uzmimo sad svojstveni bazis od $\hat{H}$ (opet pretpostavljamo, radi jednostavnosti, da $\hat{H}$ ima čisto diskretan spektar): $\{\mid E_m \rangle \mid m = 0, 1, 2, \ldots\}$. Onda $E(\psi) = \langle \psi \mid \hat{H} \mid \psi \rangle = \sum_m |\langle E_m \mid \psi \rangle|^2 E_m = |\langle E_0 \mid \psi \rangle|^2 E_1 - |\langle E_0 \mid \psi \rangle|^2 (E_1 - E_0) + \sum_{m\geq 1} |\langle E_m \mid \psi \rangle|^2 E_m \geq E_1 \sum_{m\geq 0} |\langle E_m \mid \psi \rangle|^2 - |\langle E_0 \mid \psi \rangle|^2 (E_1 - E_0)$, jer $E_m \geq E_1, \forall m \geq 1$. Pošto $\sum_{m\geq 0} |\langle E_m \mid \psi \rangle|^2 = \langle \psi \mid \psi \rangle = 1$, majoriranje negativnog člana pomoću (10.4.15) najzad dovodi do konačnog umanjenja leve strane: $E(\psi) \geq E_1 - \epsilon(E_1 - E_0)$. *Q. E. D.*

Kada pronađemo, na način koji smo objasnili u prethodnom paragrafu, u pomenutom skupu S vektor $\mid \psi_0 \rangle \in S$, koji daje apsolutni minimum $E(\psi_0)$ za $E(\psi)$, na osnovnu (10.4.14*b*) možemo očekivati da smo dobili približni nivo $E(\psi_0)$ kao aproksimaciju na E_1 i približni vektor $\mid \psi_0 \rangle$, kao aproksimaciju na odgovarajući svojstveni vektor $\mid E_1 \rangle$ od $\hat{H}$.

10.4.5 Uloga jednočestičnog i dvočestičnog statističkog operatora

Kao što smo videli, u varijacionom računu izračunavamo očekivanu vrednost $E(\psi) = \langle \psi \mid \hat{H} \mid \psi \rangle$ za neki normirani $\mid \psi \rangle \in \hat{H}$. Sad ćemo proučiti mogućnost zamene celog vektora $\mid \psi \rangle$ sa njegovim redukovanim statističkim operatorima.

Pretpostavićemo da imamo kvantni sistem od N identičnih čestica, a da je egzaktni hamiltonijan vida

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} (\hat{T}_i + \hat{V}_i) + \sum_{i<j}^{N} \hat{V}_{ij}. \tag{10.4.16}$$

Ovde je $\hat{T}_i$ operator kinetičke energije i-te čestice, $\hat{V}_i$ je operator spoljašnjeg potencijala (ako ga ima) koji deluje na česticu, a $\hat{V}_{ij}$ je operator interakcije i-te i j-te čestice. Pošto su čestice identične, $\hat{V}_i$ (kao i $\hat{T}_i$) su jednake operatorske funkcije osnovnog skupa opservabli i izvesnih spoljašnjih parametara za svih N čestica; takođe su $\hat{V}_{ij}$ date jednom te istom funkcionalnom zavisnošću od osnovnog skupa opservabli u $\mathcal{H}_i^{(u)} \otimes \mathcal{H}_j^{(u)}$ za bilo koji par čestica.

Smatra se da je N-čestični hamiltonijan vida (10.4.16) najopštiji, koji opisuje strukturu realnog kvantnog sistema, tj. da se interakcije tročestičnog tipa $\sum_{i<j<k}^{N} \hat{V}_{ijk}$ itd. ne pojavljuju u prirodi[10.4.4].

Pošto N-čestični sistem ima N jednočestičnih stepeni slobode, ima i N jednočestičnih redukovanih statističkih operatora. Ali, pošto se radi o identičnim česticama, ispostavlja se da su svi ti operatori uzajamno ekvivalentni. Zato se govori samo o jednom *jednočestičnom statističkom operatoru* $\hat{\rho}_1$ (ispušta se reč "redukovani", a uzima se u $\mathcal{H}_1^{(u)}$. Često se govori i o jednočestičnoj matrici gustine).

Zadatak 10.4.6 Pokazati da je jednočestični statistički operator i-te čestice $\hat{\rho}_i$ ekvivalentan analognom operatoru $\hat{\rho}_1$, bilo da se radi o identičnim fermionima, bilo o identičnim bozonima.

Može se izdvojiti i dvočestični stepen slobode N-čestičnog sistema i $|\,\psi_{1\ldots N}\,\rangle\langle\psi_{1\ldots N}\,|$ redukovati u *dvočestični statistički operator* $\hat{\rho}_{12}$ (koji je opet "isti" za bilo koje dve čestice).

Ispostavlja se da zbog vida (10.4.16) u očekivanoj vrednosti $\langle\psi_{1\ldots N}\mid\hat{H}\mid\psi_{1\ldots N}\,\rangle$ učestvuju samo $\hat{\rho}_1$ i $\hat{\rho}_{12}$.

Teorem 10.4.3 *Ako je hamiltonijan N identičnih čestica vida (10.4.16), onda u* proizvoljnom *stanju* $|\,\psi_{1\ldots N}\,\rangle$ *iz prostora stanja dotičnog sistema očekivana vrednost* $E(\psi_{1\ldots N})=\langle\,\psi_{1\ldots N}\mid\hat{H}\mid\psi_{1\ldots N}\,\rangle$ *može da se napiše u vidu*

$$\boxed{E(\psi_{1\ldots N})=N\mathrm{Tr}_{\,1}((\hat{T}_1+\hat{V}_1)\hat{\rho}_1)+\frac{N(N-1)}{2}\mathrm{Tr}_{\,12}\hat{V}_{12}\hat{\rho}_{12}}, \tag{10.4.17}$$

gde su

$$\hat{\rho}_1\stackrel{\mathrm{def}}{=}\mathrm{Tr}_{\,2\ldots N}\,|\,\psi_{1\ldots N}\,\rangle\langle\psi_{1\ldots N}\,|, \tag{10.4.18}$$

$$\hat{\rho}_{12}\stackrel{\mathrm{def}}{=}\mathrm{Tr}_{\,3\ldots N}\,|\,\psi_{1\ldots N}\,\rangle\langle\psi_{1\ldots N}\,|\,. \tag{10.4.19}$$

Dokaz: Pođimo od $E(\psi_{1\ldots N})=\mathrm{Tr}_{\,1\ldots N}(\hat{H}\mid\psi_{1\ldots N}\,\rangle\langle\psi_{1\ldots N}\,|)=\sum_{i=1}^N\mathrm{Tr}_{\,1\ldots N}((\hat{T}_i+\hat{V}_i)\mid\psi_{1\ldots N}\,\rangle\langle\psi_{1\ldots N}\mid)+\sum_{i<j}^N\mathrm{Tr}_{\,1\ldots N}(\hat{V}_{ij}\mid\psi_{1\ldots N}\,\rangle\langle\psi_{1\ldots N}\,|)$. Neka je $\hat{P}_{1i}$ operator permutacije (u $\mathcal{H}_1^{(u)}\otimes\cdots\otimes\mathcal{H}_N^{(u)}$) koji transponuje prvu i i-tu česticu, a ostale ne menja. Onda imamo, kao što se lako vidi, $(\hat{T}_i+\hat{V}_i)=\hat{P}_{1i}(\hat{T}_1+\hat{V}_1)\hat{P}_{1i},\ \forall i\neq 1$. Analogno, za svaki par indeksa $i<j$ postoji operator permutacije $\hat{P}_{(i<j)}$, takav da $\hat{V}_{ij}=\hat{P}_{(i<j)}\hat{V}_{12}\hat{P}_{(i<j)}^{-1}$ (uporediti (10.1.53a). Kada zamenimo ove izraze u gornju formulu za očekivanu vrednost i izvršimo cikličnu permutaciju pod tragom, imamo $E(\psi_{1\ldots N})=\sum_{i=1}^N\mathrm{Tr}_{\,1\ldots N}((\hat{T}_1+\hat{V}_1)\hat{P}_{1i}\mid\psi\,\rangle\langle\psi\mid\hat{P}_{1i})+\sum_{i<j}^N\mathrm{Tr}_{\,1\ldots N}(\hat{V}_{12}\hat{P}_{(i<j)}^{-1}\mid\psi\,\rangle\langle\psi\mid\hat{P}_{(i<j)})$. Stanje $|\,\psi\,\rangle\stackrel{\mathrm{def}}{=}|\,\psi_{1\ldots N}\,\rangle$ je fermionsko ili bozonsko, u svakom slučaju $\hat{P}_{1i}\mid\psi\,\rangle\langle\psi\mid\hat{P}_{1i}=|\,\psi\,\rangle\langle\psi\mid$ i $\hat{P}_{(i<j)}^{-1}\mid\psi\,\rangle\langle\psi\mid\hat{P}_{(i<j)}=|\,\psi\,\rangle\langle\psi\mid$ (uporediti (9.3.23, 9.3.24) i Postulat VIII u odeljku § 9.3.6). Stoga $E(\psi_{1\ldots N})=N\mathrm{Tr}_{\,1\ldots N}((\hat{T}_1+\hat{V}_1)\mid\psi\,\rangle\langle\psi\mid)+\frac{N(N-1)}{2}\mathrm{Tr}_{\,12}\hat{V}_{12}\mid\psi\,\rangle\langle\psi\mid)$. Ova formula se pomoću definicija (10.4.18) i (10.4.19) očigledno može pisati u vidu (10.4.17). *Q. E. D.*

Formuli (10.4.17) se može pripisati sledeći *fizički smisao*: Približna energija $E(\psi_{1\ldots N})$ sistema od N identičnih čestica sastoji se od N jednočestičnih energija i od $N(N-1)/2$ (broj različitih parova) energija parova čestica.

10.4.6 Redukovani statistički operatori Slater-ove determinante

Sada ćemo normirane probne vektore $|\,\psi_{1\ldots N}\,\rangle$ sistema od N identičnih fermiona *ograničiti na Slater-ove daterminante.* Proučićemo šta su onda $\hat{\rho}_1$ i $\hat{\rho}_{12}$.

[10.4.4] Ovo nije konkluzivno utvrđeno. Vršena su uspešna teorijska istraživanja i sa interakcijama тročestičnog tipa. Strogo uzev, pomenuti iskaz treba razumeti u smislu da nemamo dovoljno razloga da kvantne sisteme opisujemo hamiltonijanima, koji bi bili složenijeg vida nego što je (10.4.16).

Teorem 10.4.4 *Neka je* $\{|\, n_1\,\rangle,\ |\, n_2\,\rangle, \ldots, |\, n_N\,\rangle\}$ *skup* N *(potpuno uređenih) ortonormiranih vektora u* $\mathcal{H}_1^{(u)}$, *a* $|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle$ *neka je Slater-ova determinanta, koju oni određuju. Jednočestični statistički operator ovog* N*-čestičnog vektora glasi:*

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} |\, n_i\,\rangle_1\langle n_i\,|_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N}\hat{P}_1, \tag{10.4.20}$$

tj. $\hat{P}_1 = N\hat{\rho}_1$, *gde je* $\hat{P}_1$ *projektor na* N*-dimenzionalni potprostor od* $\mathcal{H}_1^{(u)}$, *koji obrazuju pomenuti vektori* $|\, n_1\,\rangle,\ |\, n_2\,\rangle, \ldots, |\, n_N\,\rangle$.

Dokaz: Biće dat u Dodatku § 10.4.10. *Q. E. D.*

Teorem 10.4.5 *Dvočestični statistički operator* $\hat{\rho}_{12}$ *Slater-ove determinante je sledeća funkcija jednočestičnog statističkog operatora* $\hat{\rho}_1$ *iste Slater-ove determinante:*

$$\boxed{\hat{\rho}_{12} = \tfrac{2N}{(N-1)}\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{A}_{12}}, \tag{10.4.21}$$

gde je $\hat{\rho}_2$ *jednočestični statistički operator u* $\mathcal{H}_2^{(u)}$, *a* $\hat{A}_{12} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\hat{I}_{12} - \hat{E}_{12})$ *je antisimetrizator u* $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \mathcal{H}_2^{(u)}$ *(*$\hat{E}_{12}$ *je operator izmene).*

Dokaz: Biće dat u Dodatku § 10.4.11. *Q. E. D.*

Zadatak 10.4.7 Kao što smo videli u § 9.3.3, dekompozicija $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \mathcal{H}_2^{(u)} = \mathcal{V}_a \oplus \mathcal{V}_s$ je invarijantna dekompozicija za svaki simetričan operator, pa i za $\hat{\rho}_{12}$. Pokazati da važi

$$\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{A}_{12} = \hat{A}_{12}\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2 = \hat{A}_{12}\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{A}_{12}, \tag{10.4.22a,b}$$

i da se $\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{A}_{12}$ na sledeći način odnosi prema $\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2$:

i) oba ova operatora redukuju se u isti operator u $\mathcal{V}_a$,

ii) za razliku od $\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2$, operator $\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{A}_{12}$ se redukuje u nulu u $\mathcal{V}_s$.

Zadatak 10.4.8 Objasniti zašto $\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{A}_{12}$ treba renormirati i to baš faktorom $\frac{2N}{N-1}$. (Indikacija: Izvesti relaciju $\mathrm{Tr}_{12}(\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{A}_{12}) = \frac{N(N-1)}{2}\frac{1}{N^2}$ računajući trag u $\mathcal{V}_a$ i koristeći se sa (10.4.20)).

Kad bi dvočestični statistički operator bio $\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2$, onda bismo rekli da je nekorelisan. Operator Slater-ove determinante, $\hat{\rho}_{12}$, koji je dat sa (10.4.21), je *korelisan*, ali ima *isključivo korelaciju od antisimetrizacije*, tj. od Postulata o identičnim fermionima. Drugim rečima, $\hat{\rho}_{12}$ ne sadrži nikakvu korelisanost koja bi poticala od interakcije dve čestice.

Pošto $\hat{\rho}_1$ određuje $\hat{\rho}_{12}$, nameće se pitanje ne određuje li $\hat{\rho}_1$ i samu Slater-ovu determinantu $|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle$ čiji je on jednočestični statistički operator.

Lema 10.4.6 *Svaki jednočestični statistički operator, dat kao u (10.4.20), jednoznačno određuje (neredukovani) statistički operator Slater-ove determinante, tj.* $|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle\langle n_1 < \ldots < n_N\,|$ *iz kojeg se* $\hat{\rho}_1$ *dobija redukcijom (10.4.18). Samu Slater-ovu determinantu pomenuti* $\hat{\rho}_1$ *određuje s tačnošću do otvorenog faznog faktora.*

Dokaz: Kada pođemo od $\hat{\rho}_1 = \frac{1}{N}\hat{P}_1$, gde je $\hat{P}_1$ projektor u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ takav da $\mathrm{Tr}_1\hat{P}_1 = N$, treba samo da izaberemo bazis $\{|\, n_1\,\rangle, |\, n_2\,\rangle, \ldots, |\, n_N\,\rangle\}$ u $\mathcal{R}(\hat{P}_1)$ i Teorem T 10.4.4 nam kazuje da je $\hat{\rho}_1$ jednočestični statistički operator Slater-ove determinante $|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle$. Pitanje je šta daje izbor drugog bazisa

$$\{|\, n_1'\,\rangle, |\, n_2'\,\rangle, \ldots, |\, n_N'\,\rangle\}$$

u $\mathcal{R}(\hat{P}_1)$. Neka je $|\, n_i'\,\rangle = \sum_{q=1}^N U_{iq}\,|\, n_q\,\rangle$, gde je $U \stackrel{\mathrm{def}}{=} (\,U_{ij}\,)$ unitarna matrica razvoja. Onda (uporediti (9.4.12)): $|\, n_1' < \ldots < n_N'\,\rangle = \det(\,|\, n_i'\,\rangle\,) = \det\left(\sum_{q=1}^N U_{1q}\,|\, n_q\,\rangle\right)$. Setimo se da se dve determinante množe i na sledeći način: $\det(\,a_{ij}\,)\det(\,b_{ij}\,) = \det\left(\sum_{q=1}^N a_{iq}b_{qj}\right)$.
Na osnovu toga

$$|\, n_1' < \ldots < n_N'\,\rangle = \big(\det(\,U_{ij}\,)\big)\,|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle. \tag{10.4.23}$$

Iz (10.4.23) odmah sledi $|\, n_1' < \ldots < n_N'\,\rangle\langle n_1' < \ldots < n_N'\,| = |\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle\langle n_1 < \ldots < n_N\,|$, pošto je $\det U$ fazni faktor (zbog $UU^\dagger = I$). *Q. E. D.*

Treba imati u vidu da

$$\begin{aligned} E(|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle) &= \langle n_1 < \ldots < n_N\,|\,\hat{H}\,|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle = \\ &= \mathrm{Tr}_{1\ldots N}(\hat{H}\,|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle\langle n_1 < \ldots < n_N\,|), \end{aligned} \tag{10.4.24}$$

iz čega je očigledno da je u varijacionom pristupu od važnosti samo statistički operator $|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle\langle n_1 < \ldots < n_N\,|$, tj. možemo Slater-ove determinante uzimati s tačnošću do faznog faktora. Takva jedna klasa Slater-ovih determinanti je onda tačno određena projektorom

$$\hat{P}_1 = N\hat{\rho}_1 \tag{10.4.25}$$

na neki N-dimenzionalni potprostor u $\mathcal{H}_1^{(u)}$.

10.4.7 Usrednjeni jednočestični potencijal

Neka je naš probni vektor Slater-ova determinanta. Videli smo u Teoremu T 10.4.3 da se očekivana vrednost izražava preko jednočestičnog i dvočestičnog statističkog operatora. Zamenjujući u (10.4.17) jednakosti (10.4.20) i (10.4.21) dolazimo do

$$E(|\, n_1 < \ldots < n_N\,\rangle) = \sum_{i=1}^N \langle n_i\,|\,(\hat{T} + \hat{V})\,|\, n_i\,\rangle + N^2\mathrm{Tr}_{12}(\hat{V}_{12}\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{A}_{12}). \tag{10.4.26}$$

Sad je pogodno definisati *usrednjeni jednočestični potencijal*[10.4.5]:

$$\boxed{\hat{W}_1 \stackrel{\mathrm{def}}{=} 2N\mathrm{Tr}_2\hat{A}_{12}\hat{V}_{12}\hat{\rho}_2} \tag{10.4.27}$$

(Tr_2 je parcijalni trag po svim koordinatama druge čestice). Treba zapaziti da je $\hat{W}_1$ funkcija izbora Slater-ove determinante (što ulazi u (10.4.27) preko $\hat{\rho}_2$), tj. za svaku datu Slater-ovu

[10.4.5] Čitalac će u literaturi često naći da se umesto $\hat{A}_{12} = \frac{1}{2}(\hat{I}_{12} - \hat{E}_{12})$ u (10.4.27) pojavljuje posebno $\hat{I}_{12}$ i posebno $\hat{E}_{12}$. Tako se dobijaju dva usrednjena potencijala, običan iz $\hat{V}_{12}\hat{I}_{12} = \hat{V}_{12}$ i tzv. *izmenski* (engleski: *exchange potential*) od $\hat{V}_{12}\hat{E}_{12}$

determinantu (10.4.27) definiše se po jedan $\hat{W}_1$. Drugi sabirak na desnoj strani od (10.4.26) uz pomoć (10.4.27) postaje $\frac{N}{2}\mathrm{Tr}_1(\hat{W}_1\hat{\rho}_1) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\langle n_i \mid \hat{W} \mid n_i \rangle$, a (10.4.26) prelazi u jednakost

$$\boxed{E(\mid n_1 < \ldots < n_N \rangle) = \sum_{i=1}^{N}\langle n_i \mid (\hat{T} + \hat{V} + \tfrac{1}{2}\hat{W}) \mid n_i \rangle}. \tag{10.4.28}$$

Rezultat (10.4.28) ima veoma jednostavnu *fizičku interpretaciju*: Ako je stanje sistema od N identičnih fermiona dato Slater-ovom determinantom $\mid n_1 < \ldots < n_N \rangle$ (bez obzira da li se radi o tačnom ili o približnom opisivanju stanja), onda je energija sistema (tačna ili približna) zbir jednočestičnih energija $\langle n_i \mid (\hat{T} + \hat{V} + \frac{1}{2}\hat{W}) \mid n_i \rangle$, koje odgovaraju pojedinim popunjenim jednočestičnim stanjima $\mid n_i \rangle$, $i = 1, 2, \ldots, N$. Pri tome pomenuta jednočestična stanja "vide" od dvočestične interakcije samo usrednjeni jednočestični potencijal $\frac{1}{2}\hat{W}$.

Uzgred budi primećeno, nerazličivost čestica ogleda se u tome što nije određeno koja čestica je u kojem od stanja $\mid n_1 \rangle, \mid n_2 \rangle, \ldots, \mid n_N \rangle$. Ali, pada u oči da su sada ova stanja itekako različiva (pošto su ortogonalna), tako da možemo govoriti o stanjima umesto o česticama. Ovu ćemo ideju iskoristiti u glavi 11 za uvođenje tzv. *druge kvantizacije* (to neće biti nov postulat, nego samo pogodna reformulacija formalizma kojim već raspolažemo).

Čitaocu verovatno nije jasno

i) zašto stanje $\mid n_i \rangle$ "vidi" interakciju kao $\frac{1}{2}\hat{W}$, čime samo izražavamo činjenicu da je sabirak u (10.4.28) $\langle n_i \mid \frac{1}{2}\hat{W} \mid n_i \rangle$;

ii) zašto smo usrednjeno polje definisali kao u (10.4.27) (a ne, na primer, bez faktora 2).

Detaljniji odgovor na pitanje (i) sledi iz: $LS \equiv \langle n_i \mid \frac{1}{2}\hat{W} \mid n_i \rangle = \frac{1}{2}2N\langle n_i \mid \mathrm{Tr}_2(\hat{A}_{12}\hat{V}_{12}\hat{\rho}_2) \mid n_i \rangle$; uvodeći bazis $\{\mid m \rangle_2 \mid m = 1, 2, \ldots\}$ u $\mathcal{H}_2^{(u)}$ tako da su prvih N vektora upravo naša popunjena stanja (u Slater-ovoj determinanti) $\mid n_1 \rangle_2, \mid n_2 \rangle_2, \ldots, \mid n_N \rangle_2$, imamo $LS = N\sum_m\langle n_i, m \mid \hat{A}_{12}\hat{V}_{12}\hat{\rho}_2 \mid n_i, m \rangle$, a pošto imamo projektor $N\hat{\rho}_2 = \sum_{j=1}^{N} \mid n_j \rangle_2\langle n_j \mid_2$ i $\hat{A}_{12} = \hat{A}_{12}^2$ (takođe $\hat{A}_{12}\hat{V}_{12} = \hat{V}_{12}\hat{A}_{12}$), to daje $LS = \sum_{j=1}^{N}\langle n_i, n_j \mid \hat{A}_{12}\hat{V}_{12}\hat{A}_{12} \mid n_i, n_j \rangle \Rightarrow$

$$\langle n_i \mid \frac{1}{2}\hat{W} \mid n_i \rangle = \frac{1}{2}\sum_{j=1\ (j\neq i)}^{N}\langle n_in_j \mid \hat{V}_{12} \mid n_in_j \rangle, \tag{10.4.29a}$$

gde je $\mid n_in_j \rangle$ Slater-ova determinanta, tj. s tačnošću do predznaka $\mid n_in_j \rangle = \sqrt{2}\hat{A}_{12} \mid n_i \rangle \mid n_j \rangle$ (predznak je plus ako $n_i < n_j$, inače je minus). Sabirak $\mid n_i, n_i \rangle$ sam otpada, jer ne daje Slater-ovu determinantu.

Izraz $\langle n_in_j \mid \hat{V}_{12} \mid n_in_j \rangle$ u (10.4.29a) možemo *fizički interpretirati* kao interakciju čestice u stanju $\mid n_i \rangle$ i čestice u stanju $\mid n_j \rangle$, a zbir u (10.4.29a) kao interakciju čestice u stanju $\mid n_i \rangle$ sa svim ostalim česticama. Pošto je leva strana od (10.4.29a) sumand u (10.4.28), gde se sabira sa popunjenim stanjima, mora se na desnoj strani od (10.4.29a) pojaviti faktor $\frac{1}{2}$, inače bi se svaka interakcija $\langle n_in_j \mid \hat{V}_{12} \mid n_in_j \rangle$ računala dvaput, jedanput njen doprinos u $\langle n_i \mid \hat{W} \mid n_i \rangle$, a drugi put u $\langle n_j \mid \hat{W} \mid n_j \rangle$.

Lako se vidi, zamenjujući eksplicitni vid $\hat{A}_{12}$ u (10.4.29a), da (10.4.29a) može da se napiše u ekvivalentnoj formi:

$$\langle n_i \mid \frac{1}{2}\hat{W} \mid n_i \rangle = \frac{1}{2}\sum_{j=1\ (j\neq i)}^{N}(\langle n_i, n_j \mid \hat{V}_{12} \mid n_i, n_j \rangle - \langle n_i, n_j \mid \hat{V}_{12} \mid n_j, n_i \rangle), \tag{10.4.29b}$$

gde je $| n_i, n_j \rangle \stackrel{\text{def}}{=} | n_i \rangle \otimes | n_j \rangle$. Kao što je rečeno i u Primedbi 10.4.5, prvi sabirak na desnoj strani naziva se običnim ili direktnim članom, a drugi sabirak izmenskim članom, tj. članom koji potiče od *izmenske interakcije* $\hat{V}_{12}\hat{E}_{12}$. Izrazi (10.4.29*a*) i (10.4.29*b*) su dva ekvivalentna vida ispoljavanja Pauli-jevog principa u dvočestičnoj interakciji.

Odgovor na pitanje (ii) ćemo dobiti u sledećem paragrafu.

10.4.8 Samousaglašeno polje i Hartree-Fock jednakosti

U prethodnom paragrafu smo pošli od proizvoljne Slater-ove determinante (kao probnog vektora). Sada ćemo izvesti jednakosti koje određuju *najbolju* Slater-ovu determinantu za opisivanje *osnovnog stanja* sistema od N identičnih fermiona. Drugim rečima, rešavamo varijacioni problem osnovnog stanja, a skup S probnih funkcija je skup svih N-čestičnih Slater-ovih determinanti.

Videli smo u paragrafu § 10.4.3 da je potreban uslov za vektor $| n_1 < \ldots < n_N \rangle$, koji daje apsolutni minimum (u pomenutom skupu S) za $E(| n_1 < \ldots < n_N \rangle)$ da:

$$\delta E(| n_1 < \ldots < n_N \rangle) = 0. \tag{10.4.30}$$

Pišući kao u (10.4.25) $\hat{P}_1 = N\hat{\rho}_1$, (10.4.17) i (10.4.21) daju

$$E(| n_1 < \ldots < n_N \rangle) \stackrel{\text{def}}{=} E(\hat{P}_1) = \text{Tr}_1((\hat{T}_1 + \hat{V}_1)\hat{P}_1) + \text{Tr}_{12}(\hat{A}_{12}\hat{V}_{12}\hat{P}_1\hat{P}_2). \tag{10.4.31}$$

Tražimo stacionarne tačke ovog funkcionala, tj. tražimo $\hat{P}_1$, za koje $\delta E(\hat{P}_1) = 0$, a da pri tome rešenja zadovoljavaju

$$\text{Tr}_1\hat{P}_1 = N, \qquad \hat{P}_1 = \hat{P}_1^2, \tag{10.4.32a,b}$$

i da su hermitski operatori. Ograničenja (10.4.32) treba da važe i za varijacije, tj. mi tražimo uslovne stacionarne tačke (među hermitskim operatorima), pod uslovom (10.4.32).

Teorem 10.4.6 *Slater-ova determinanta je uslovna stacionarna tačka pod uslovom (10.4.32), tj. pod uslovom da varijacije ne izlaze iz skupa Slater-ovih determinanti, ako i samo ako*

$$\boxed{[\, \hat{h}_1, \hat{\rho}_1 \,] = 0}, \tag{10.4.33}$$

gde je $\hat{h}_1$ jednočestični hamiltonijan:

$$\boxed{\hat{h}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \hat{T}_1 + \hat{V}_1 + \hat{W}_1}, \tag{10.4.34}$$

a $\hat{\rho}_1$ je jednočestični statistički operator Slater-ove determinante, koji istovremeno i određuje tu Slater-ovu determinantu.

Dokaz: Iz (10.4.31) se dobija $\delta E(\hat{P}_1) = \text{Tr}_1((\hat{T}_1 + \hat{V}_1)\delta\hat{P}_1) + \text{Tr}_{12}(\hat{A}_{12}\hat{V}_{12}(\delta\hat{P}_1)\hat{P}_2) + \text{Tr}_{12}(\hat{A}_{12}\hat{V}_{12}\hat{P}_1(\delta\hat{P}_2))$. U poslednjem sabirku pod tragom možemo da primenimo transformaciju sličnosti unitarnim oporatorom $\hat{E}_{12}$ (operatorom izmene), a $\hat{E}_{12}\hat{A}_{12}\hat{V}_{12}\hat{P}_1(\delta\hat{P}_2)\hat{E}_{12}^{-1} = \hat{A}_{12}\hat{V}_{12}(\delta\hat{P}_1)\hat{P}_2$, te stoga imamo $\delta E(\hat{P}_1) = \text{Tr}_1((\hat{T}_1 + \hat{V}_1)\delta\hat{P}_1) + 2\text{Tr}_{12}(\hat{A}_{12}\hat{V}_{12}(\delta\hat{P}_1)\hat{P}_2)$. Ako sad iskoristimo izraz za $\hat{W}_1$ iz (10.4.27) i $\hat{h}_1$ iz (10.4.34), onda $\delta E(\hat{P}_1) = \text{Tr}_1((\hat{T}_1 + \hat{V}_1 + \hat{W}_1)\delta\hat{P}_1) = \text{Tr}_1(\hat{h}_1\delta\hat{P}_1)$. Prema tome, $\delta E(\hat{P}_1) = 0$ se svodi na

$$\text{Tr}_1(\hat{h}_1(\hat{P}_1)\,\delta\hat{P}_1) = 0. \tag{10.4.35}$$

Pored (10.4.35), moramo još imati (10.4.32b) kao ograničenje na prvu varijaciju[10.4.6], što daje

$$\delta\hat{P}_1 - (\delta\hat{P}_1)\hat{P}_1 - \hat{P}_1(\delta\hat{P}_1) = 0. \qquad (10.4.36)$$

Variraćemo $\hat{P}_1$ u skupu hermitskih operatora, a varijacioni uslov (10.4.36) ćemo uzeti u obzir metodom Lagrange-ovih multiplikatora[10.4.7] (kojim se u teoriji uslovnih varijacija svodi uslovno variranje na bezuslovno). Operatorsku jednakost (10.4.36) pomnožićemo operatorskim multiplikatorom $\hat{\Lambda}_1$ (nepoznatim hermitskim operatorom u $\mathcal{H}_1^{(u)}$). Nakon množenja s leva sa $\hat{\Lambda}_1$, uzećemo trag i onda ćemo tu jednakost oduzeti od (10.4.35). Tako ćemo dobiti (permutujući ciklično pod tragom, gde je to potrebno):

$$\mathrm{Tr}_1((\hat{h}_1 - \hat{\Lambda}_1 + \hat{P}_1\hat{\Lambda}_1 + \hat{\Lambda}_1\hat{P}_1)\delta\hat{P}_1) = 0, \qquad (10.4.37)$$

kao izraz koji je variran bazuslovno, tj. $\delta\hat{P}_1$ je sad proizvoljan mali hermitski operator (a traže se dva hermitska operatora: $\hat{P}_1$ koji je projektor sa tragom N i $\hat{\Lambda}_1$, tako da važi (10.4.37)).
Zbog proizvoljnosti $\delta\hat{P}$, sledi kao potreban i dovoljan uslov za rešenje da se nađu $\hat{P}$ i $\hat{\Lambda}$ takvi da

$$\hat{h} - \hat{\Lambda} + \hat{P}\hat{\Lambda} + \hat{\Lambda}\hat{P} = 0, \qquad (10.4.38)$$

gde izostavljamo indeks "1" (sad smo stalno u $\mathcal{H}_1^{(u)}$).

Zadatak 10.4.9 Pokazati da $\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B} = 0$, gde je $\hat{A}$ određeni, a $\hat{B}$ proizvoljan hermitski operator, iziskuje $\hat{A} = 0$. (Indikacija: Neka je $\mid\psi\,\rangle$ proizvoljno stanje. Staviti $\hat{B} = \mid\psi\,\rangle\langle\,\psi\mid$, $\forall\mid\psi\,\rangle$ i dokazati da $\langle\,\psi\mid\hat{A}\mid\psi\,\rangle = 0$, $\forall\mid\psi\,\rangle$ ima za posledicu $\hat{A} = 0$.)

Pomnožimo jednakost (10.4.38) prvo s desna sa $\hat{P}$, a posebno s leva sa $\hat{P}$ i oduzmimo drugu od prve. Tako sledi

$$[\,\hat{h}, \hat{P}\,] = 0, \qquad (10.4.39)$$

što je zbog $\hat{\rho} = \frac{1}{N}\hat{P}$ ekvivalentno sa (10.4.33).
Da je jednakost (10.4.39) ne samo potrebna nego i dovoljna za (10.4.38), možemo videti definišući

$$\hat{\Lambda} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \hat{h} - \hat{h}\hat{P} - \hat{P}\hat{h}. \qquad (10.4.40)$$

Kad zamenimo (10.4.40) na levoj strani od (10.4.38), onda sledi $LS = \hat{h} - \hat{h} + \hat{h}\hat{P} + \hat{P}\hat{h} + \hat{P}\hat{h} - \hat{P}\hat{h}\hat{P} - \hat{P}^2\hat{h} + \hat{h}\hat{P} - \hat{h}\hat{P}^2 - \hat{P}\hat{h}\hat{P}$, što zbog $\hat{P}^2 = \hat{P}$ i $\hat{P}\hat{h} = \hat{h}\hat{P}$ daje nulu, tj. važi (10.4.38). *Q. E. D.*

Zadatak 10.4.10 Uzeti u obzir i (10.4.32a) kao varijaciono ograničenje. To će dodati sabirak $-\lambda$, gde je λ realan broj, u maloj zagradi pod tragom u (10.4.37). Pokazati da se dobija isto rešenje (10.4.39).

Komutaciona relacija (10.4.33) je tzv. *Hartree-Fock-ova jednakost*[10.4.8] To je, kao što se to kaže, Euler-Lagrange-ova jednakost našeg varijacionog problema, tj. u stvari modelni dinamički zakon, gde je "model" skup S svih Slater-ovih determinanti kao probnih funkcija.

[10.4.6] Pošto je $\mathrm{Tr}\,\hat{P} = \dim\mathcal{R}(\hat{P})$, diskretna funkcija projektora $\hat{P}$, u infinitezimalnoj okolini bilo kog projektora mora biti $\delta\mathrm{Tr}\,\hat{P} = \mathrm{Tr}\,\delta\hat{P} = 0$, a (10.4.32$a$) kao varijaciono ograničenje bi dalo upravo to. Prema tome, to u stvari nije ograničenje na varijaciju projektora i ovaj uslov možemo izostaviti (uporediti Zadatak Z 10.4.10).

[10.4.7] Metod Lagrange-ovih multiplikatora je standardan način nalaženja uslovnih stacionarnih tački (videti, na primer, Г. Корн и Т. Корн, *Справочник по математике*, Наука, Москва, 1968, 11.5-2.). Ovaj metod se uopštava na operatore tako da u slučaju kada je jednakost koja je ograničenje na varijaciju operatorska jednakost (kao što je (10.4.32b)), onda je odgovarajući Lagrange-ov multiplikator takođe operator. U našem slučaju on je hermitski operator, jer je ograničenje (10.4.32b) jednakost hermitskih operatora.

[10.4.8] Čitati: Hartri-Fok.

Prepišimo (10.4.33) u vidu $[\ \hat{h}, \hat{P}\ ] = 0$ i setimo se da dva hermitska operatora komutiraju ako i samo ako postoji zajednički svojstveni bazis za njih. Neka je $\{|\ n_1\ \rangle, |\ n_2\ \rangle, \ldots, |\ n_N\ \rangle\}$ zajednički svojstveni podbazis, čijim vektorima odgovara svojstvena vrednost 1 za $\hat{P}$. Onda

$$\boxed{\hat{h}\ |\ n_i\ \rangle = \epsilon_i\ |\ n_i\ \rangle,\ i = 1, 2, \ldots, N} \tag{10.4.41}$$

i $\sum_{i=1}^{N} |\ n_i\ \rangle\langle n_i\ | = \hat{P}$ ili $|\ n_1 < \ldots < n_N\ \rangle$ je Slater-ova determinanta o kojoj je reč. Kao što se odmah vidi, (10.4.41) je ne samo potrebno, nego i dovoljno za (10.4.33) i prema tome, predstavlja ekvivalentnu (i više korišćenu) *formu Hartree-Fock-ovih jednakosti.*

Slater-ova determinanta $|\ n_1 < \ldots < n_N\ \rangle$ definiše $\hat{h} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{W}$, zapravo usrednjeni jednočestični potencijal $\hat{W}$ (videti (10.4.27)), koji jedini u $\hat{h}$ nije a priori zadat. S druge strane, kao što vidimo iz (10.4.41), $\hat{h}$ definiše Slater-ovu detarminantu, tj. "krug" se zatvara:

$$(\hat{P} \Leftrightarrow |\ n_1 < \ldots < n_N\ \rangle) \longrightarrow (\hat{h} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{W}) \longrightarrow \hat{P}. \tag{10.4.42}$$

Zbog toga se $\hat{W}$, pošto je definisan Slater-ovom determinantom koja je rešenje Hartree-Fock-ovih jednakosti (tj. koja je stacionarna tačka), naziva *samousaglašeno polje* (ovde je reč "polje" sinonim za potencijal). A *metodom samousaglašenog polja* naziva se postupak iznalaženja stacionarnog rešenja $|\ n_1 < \ldots < n_N\ \rangle$, tj. Slater-ove determinante za koju se "krug" (10.4.42) zatvara.

Samousaglašenom polju odgovara razlaganje

$$\boxed{\sum_{i<j}^{N} \hat{V}_{ij} = \sum_{i=1}^{N} \hat{W}_i + \sum_{i<j}^{N} \hat{V}_{ij}^{(\text{rez})}} \tag{10.4.43}$$

operatora interakcije N identičnih fermiona na samousaglašeno polje i na rezidualnu interakciju $\sum_{i<j}^{N} \hat{V}_{ij}^{(\text{rez})}$, koja je definisana upravo sa (10.4.43).

Na hamiltonijanu $\hat{H}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i$ koji preko $\hat{h}_i$ sadrži samousaglašeno polje $\hat{W}_i$, se obično gradi *model nezavisnih čestica* (ili: model ljuski, uporediti § 9.4.3) i $\hat{H}_0$ se često uzima za neperturbisani hamiltonijan (uporediti (10.1.45). Istakli smo u § 10.1.7 da $\hat{W}$ ukida "slučajnu" degeneraciju koja postoji u Coulomb-ovom polju i, osim toga, omogućuje da se efekat zastiranja elektrona iz *core*-a uzme u obzir bar u nultoj aproksimaciji (po $\hat{H}' \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i<j}^{N} \hat{V}_{ij}^{(\text{rez})}$).

Pažljivi čitalac je zapazio da samousaglašeno polje možemo da dobijemo od bilo kojih N rešenja svojstvenog problema od $\hat{h}$ (ako se "krug" (10.4.42) praktično zatvorio). S druge strane, nismo još ostvarili našu nameru da varijaciono izračunamo baš *osnovno stanje.* Upravo radi toga uzimamo N svojstvenih vektora u (10.4.41) tako da $E_0^0 = \sum_{i=1}^{N} \epsilon_i$ bude što je moguće manje, tj. da imamo osnovno stanje $\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i$ (naravno, unutar $\mathcal{V}_a$, videti § 9.4.3).

Koliko god uzimanje E_0^0 izgledalo prirodno, treba imati na umu da $E(|\ n_1 < \ldots < n_N\ \rangle) \neq \sum_{i=1}^{N} \epsilon_i = \sum_{i=1}^{N} \langle n_i\ |\ (\hat{T} + \hat{V} + \hat{W})\ |\ n_i \rangle$, nego je $E(|\ n_1 < \ldots < n_N \rangle) = \sum_{i=1}^{N} \langle n_i\ |\ (\hat{T} + \hat{V} + \frac{1}{2}\hat{W})\ |\ n_i \rangle$. Ipak, u većini slučajeva uzimanje E_0^0 vodi ka iznalaženju apsolutnog minimuma.

Na kraju da napomenemo da se Hartree-Fock-ove jednakosti obično rešavaju tzv. *iteracionom metodom* (kompjuterski): pođe se od neke manje-više dobro pogođene Slater-ove determinante, pa se iz nje izračuna $\hat{W}$ i $\hat{h}$. Onda se rešava svojstveni problem od $\hat{h}$ i dobije novi vektor stanja $|\ n_1 < \ldots < n_N\ \rangle$. Time se završava prva iteracija, tj. oba koraka u (10.4.42), ali "krug" se još nije zatvorio. Rezultat prve iteracije (tj. $\hat{P}_1 \leftrightarrow |\ n_1 < \ldots < n_N\ \rangle$) je početak druge iteracije,

koja je analogna prvoj, itd. Iteriranje se zaustavlja kad više ne daje promene van intervala tačnosti računanja (koji je unapred fiksiran), tj. kada se "krug" (10.4.42) praktično zatvorio. Ako postupak ne konvergira, mora se početi iznova drugom polaznom Slater-ovom determinantom koja će biti bolje pogođena.

Ponekad se iteracija započinje sa $\hat{h}$. Pođe se od nekog $\hat{W}$ (koji još nije samousaglašeno polje, samo neka vrsta usrednjenog potencijala) i reši (10.4.41) uzimajući najniže nivoe ϵ_i. Iz dobijenog $| n_1 < \ldots < n_N \rangle$ se ponovo računa $\hat{W}$ itd.

Naravno, iteracioni postupak se ne vrši u celom $\mathcal{H}_1^{(u)}$ nego u nekom njegovom pogodno odabranom konačno-dimenzionalnom potprostoru. Ovakvo ograničenje je neophodno da bi se uopšte moglo računati.

10.4.9 * Ograničenje Hartree-Fock rešenja zahtevom rotacione simetrije

Kao što smo pomenuli u prethodnom paragrafu, hamiltonijan $\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i$, $\hat{h}_i = \hat{T}_i + \hat{V}_i + \hat{W}_i$, gde je $\hat{W}_i$ samousaglašeno polje, se često koristi kao neperturbisani hamiltonijan (a $\hat{H}' \stackrel{\text{def}}{=} \hat{V}_{ij}^{(\text{rez})}$ je onda perturbacija). Tako se kombinovanjem varijacionog računa (iznalaženje samousaglašenog $\hat{W}$) i perturbacionog računa postižu bolji rezultati.

Pri proučavanju perturbacionog računa u primeni na hamiltonijan $\hat{H}_0$ sa određenom grupom simetrije G uverili smo se da u slučaju kada neperturbisani hamiltonijan $\hat{H}_0$ ima istu grupu simetrije G, onda nam se pružaju velike prednosti uklanjanja degeneracije koja potiče od G (redukcijom problema u "fioku ormara"). Postavlja se pitanje možemo li (i ako da, na koji način) da samousaglašeno polje $\hat{W}$ izračunamo tako da $\hat{H}_0$ *ima simetriju* G.

Ograničićemo se na najvažniji slučaj rotacione grupe $G = \mathrm{R}(3)$, ali svi rezultati će važiti po analoglji i za druge grupe simetrije. Poći ćemo od pretpostavke da perturbisani hamiltonijan $\hat{H} = \sum_{i=1}^N (\hat{T}_i + \hat{V}_i) + \sum_{i<j}^N \hat{V}_{ij}$ sistema od N identičnih fermiona ima rotacionu simetriju i to u jačem smislu da ova simetrija važi posebno za sabirak jednočestičnog tipa $\sum_{i=1}^N (\hat{T}_i + \hat{V}_i)$ i posebno za sabirak dvočestičnog tipa $\sum_{i<j}^N \hat{V}_{ij}$. Drugim rečima, pretpostavljamo da važi:

$$[\ \hat{T}_1 + \hat{V}_1, \hat{U}_1(\varphi\mathbf{u})\ ] = 0,\ [\ \hat{V}_{12}, \hat{U}_1(\varphi\mathbf{u})\hat{U}_2(\varphi\mathbf{u})\ ] = 0,\ \forall\varphi\mathbf{u} \text{ iz } \pi\text{-lopte} \qquad (10.4.44a,b)$$

Zadatak 10.4.11 Pokazati da je (10.4.44a) ekvivalentno sa $[\ \sum_{i=1}^N (\hat{T}_i + \hat{V}_i), \hat{U}_1(\varphi\mathbf{u}) \ldots \hat{U}_N(\varphi\mathbf{u})\ ] = 0$, $\forall\varphi\mathbf{u}$, a (10.4.44b) da je ekvivalantno sa $[\ \sum_{i<j}^N \hat{V}_{ij}, \hat{U}_1(\varphi\mathbf{u}) \ldots \hat{U}_N(\varphi\mathbf{u})\ ] = 0$, $\forall\varphi\mathbf{u}$. (Indikacija: Da iz poslednjih jednakosti slede (10.4.44) pokazati preko bazisa u $\mathcal{H}_{1\ldots N}^{(u)}$, kojeg indukuje neki bazis $\{| n \rangle_1 \mid \forall n\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ i preko matričnih elemenata. Prethodno pokazati da na primer $(\hat{T}_1 + \hat{V}_1)$ i $(\hat{T}_2 + \hat{V}_2)$ imaju jednake matrične elemente u odgovarajućim bazisima.)

Lema 10.4.7 *Ako važi (10.4.44), onda je rotaciona simetričnost jednočestičnog statističnog operatora Slater-ove determinante, tj.*

$$[\ \hat{\rho}_1, \hat{U}_1(\varphi\mathbf{u})\ ] = 0,\ \forall\varphi\mathbf{u}, \qquad (10.4.45)$$

dovoljan uslov za

$$[\ \hat{h}_1, \hat{U}_1(\varphi\mathbf{u})\ ] = 0. \qquad (10.4.46)$$

Zadatak 10.4.12 Pokazati prvo da važi poznati stav da $\mathrm{Tr}\,\hat{A} = \mathrm{Tr}\,(\hat{O}\hat{A}\hat{O}^{-1})$, gde je $\hat{A}$ proizvoljan operator, a $\hat{O}$ proizvoljan nesingularan operator. Pokazati zatim da analogan iskaz važi i za parcijalni trag:

$$\mathrm{Tr}_2\hat{A}_{12} = \mathrm{Tr}_2\hat{O}_2\hat{A}_{12}\hat{O}_2^{-1}, \tag{10.4.47}$$

gde je $\hat{A}_{12}$ sada proizvoljan dvočestični operator, a $\hat{O}_2$ proizvoljan nesingularan operator za drugu česticu (jednakost (10.4.47) važi u $\mathcal{H}_1^{(u)}$, a $\hat{A}_{12}$ deluje u $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \mathcal{H}_2^{(u)}$).

Zadatak 10.4.13 Pokazati da važi

$$\hat{B}_1(\mathrm{Tr}_2\hat{A}_{12})\hat{C}_1 = \mathrm{Tr}_2(\hat{B}_1\hat{A}_{12}\hat{C}_1), \tag{10.4.48}$$

za svaka tri operatora u odgovarajućim prostorima.

Dokaz: (Leme L 10.4.7) Pođimo od definicije (10.4.27) $\hat{W}_1 \stackrel{\text{def}}{=} 2N\mathrm{Tr}_2\hat{V}_{12}\hat{A}_{12}\hat{\rho}_2$ (ovde je $\hat{A}_{12}$ antisimetrizator) i izračunajmo $\hat{U}_1\hat{W}_1\hat{U}_1^{-1}$ pod pretpostavkom (10.4.45): $\hat{U}_1\hat{W}_1\hat{U}_1^{-1} = 2N\mathrm{Tr}_2(\hat{U}_2^{-1}\hat{U}_1\hat{U}_2\hat{V}_{12}\hat{A}_{12}\hat{\rho}_2\hat{U}_1^{-1}) = 2N\mathrm{Tr}_2(\hat{U}_2^{-1}\hat{V}_{12}\hat{A}_{12}\hat{U}_1\hat{U}_2\hat{\rho}_2\hat{U}_1^{-1})$ ($\hat{V}_{12}$ komutira sa $\hat{U}_1\hat{U}_2$ usled pretpostavljene simetrije (10.4.44*b*), a $\hat{A}_{12} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\hat{I}_{12} - \hat{E}_{12})$ komutira sa $\hat{U}_1\hat{U}_2$, jer $\hat{E}_{12}$ komutira, a ovo komutiranje potiče od simetričnosti samog operatora $\hat{U}_1\hat{U}_2$). Dalje, $\hat{U}_1\hat{W}_1\hat{U}_1^{-1} = 2N\mathrm{Tr}_2(\hat{U}_2^{-1}\hat{V}_{12}\hat{A}_{12}\hat{U}_2\hat{\rho}_2) = 2N\mathrm{Tr}_2(\hat{V}_{12}\hat{A}_{12}(\hat{U}_2\hat{\rho}_2\hat{U}_2^{-1})) = 2N\mathrm{Tr}_2(\hat{V}_{12}\hat{A}_{12}\hat{\rho}_2) = \hat{W}_1$. Dokazano komutiranje $\hat{W}_1$ sa proizvoljnom rotacijom $\hat{U}_1$ usled (10.4.44*a*) očigledno povlači (10.4.46). *Q. E. D.*

Iz Leme L 10.4.7 vidimo da započinjući iteriranje sa $\hat{\rho}_1 = \frac{1}{N}\hat{P}_1$, koji ima rotacionu simetričnost (10.4.45) dolazimo do $\hat{h}_1$ koji je takođe rotaciono simetričan. Sad moramo videti kako ćemo rešavanjem svojstvenog problema (10.4.41) doći do popravljenog $\hat{\rho}_1 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mid n_1\rangle\langle n_i \mid$, koji je takođe rotaciono simetričan.

Pretpostavićemo da je n kvantni broj energije, tj. svojstvenih vrednosti od $\hat{h}$ u (10.4.41), i da smo hamiltonijan $\hat{h}$ dopunili do kompletnog skupa kompatibilnih opservabli sa $\hat{\mathbf{K}}^2$, $\hat{K}_z$ i eventualno drugim opservablama. Onda rešenja od (10.4.41) pišemo kao $\mid nkm\lambda\rangle$, a $\hat{P}_1 = \sum \mid nkm\lambda\rangle\langle nkm\lambda \mid$ sa N sabiraka, čiji su odgovarajući nivoi $\epsilon_{nk\lambda}$ najniži (imajući u vidu Paulijev princip), još izračunavamo osnovno stanje.

Lema 10.4.8 *Projektor $\hat{P}_1 = \sum \mid nkm\lambda\rangle\langle nkm\lambda \mid$ komutira sa svim operatorima rotacije ako i samo ako ovaj zbir sadrži samo cele multiplete, tj. ako i samo ako $\hat{P}_1$ sa svakim $\mid nkm\lambda\rangle\langle nkm\lambda \mid$ sadrži kao sabirke i ostalih $2k$ projektora pravaca sa istim n, k, λ.*

Dokaz: Dokaz se lakše vidi na jeziku potprostora. Komutiranje $\hat{P}_1$ sa operatorima rotacija znači invarijantnost oblasti likova $\mathcal{R}(\hat{P}_1)$ za rotacionu grupu u $\mathcal{H}_1^{(u)}$. Onda se nastavljanjem invarijantne dekompozicije od $\mathcal{R}(\hat{P}_1)$ do ireducibilnih potprostora (tj. do "kolona" u "ormarima sa fiokama") dolazi, očigledno, do pomenutih multipleta ($\sum_{m=-k}^{k} \mid nkm\lambda\rangle\langle nkm\lambda \mid$ projektuje na jednu "kolonu", tj. na jedan ireducibilni potprostor). I obratno je očigledno: uzimajući ortogonalni zbir ireducibilnih potprostora nužno dobijamo invarijantni potprostor. *Q. E. D.*

Dakle, samousaglašeno polje $\hat{W}$ koje je rotaciono simetrično možemo dobiti ako se N najnižih nivoa $\epsilon_{nk\lambda}$ multipletski zatvara u smislu leme L 10.4.8. U slučaju zatvorenih podljuski atomskog omotača, na primer, baš se to dešava.

Pomenuto multipletsko zatvaranje, u kojem se sastoji rotaciona simetrija od $\hat{P}_1$ je ipak više izuzetak nego pravilo. Često se radi dobijanja sferno simetričnog $\hat{H}_0$ za perturbacioni račun odustaje od varijacionog iznalaženja samousaglašenog usrednjenog polja $\hat{W}$, tj. od Hartree-Fock

metoda[10.4.9]. Umesto toga, koristi se jedan fiksirani, manje-više dobro pogođeni srednji potencijal $\hat{W}$, koji nije samousaglašen, ali ipak daje odgovarajuće razbijanje interakcije (10.4.43), tako da se $\hat{H}_0$ i $\hat{H}'$ definišu u punoj analogiji sa Hartree-Fock slučajem.

Čitalac je verovatno stekao utisak da u slučaju da je zadovoljen pomenuti uslov multipletskog zatvaranja N najnižih nivoa od $\hat{h}$ (i to u svakoj iteraciji), ne možemo ništa bolje nego li naći upravo to rotaciono simetrično Hartree-Fock rešenje. Međutim, iskustvo pokazuje da nije nužno tako. U literaturi su poznati slučajevi u kojima je nađeno ne-rotaciono-simetrično Hartree-Fock rešenje sa znatno nižom energijom (osnovnog stanja) nego što je dalo rotaciono-simetrično Hartree-Fock rešenje iako je ovo bilo prirodno u smislu multipletskog zatvaranja N najnižih nivoa (za razliku od "neprirodnog" rešenja iz Primedbe 10.4.9).

Zadatak 10.4.14 Pokazati da rotaciona simetričnost projektora $\hat{P}_1$ znači da odgovarajuća Slater-ova determinanta $|\, n_1 < \ldots < n_N \,\rangle$ sadrži samo cele multiplete.

Zadatak 10.4.15 Objasniti zašto rotaciono simetrična Hartree-Fock rešenja (bilo da su "prirodna" za osnovno stanje kao u tekstu, bilo "neprirodna" kao u Primedbi 10.4.9) pripadaju užem skupu probnih vektora, koji su Slater-ove determinante koje sadrže samo cele multiplete, ali da stacionarnost (nultost prve varijacije) važi u odnosu na širi skup svih Slater-ovih determinanti.

10.4.10 * DODATAK 1 — Izračunavanje jednočestičnog statističkog operatora Slater-ove determinante

Dokaz: (Dokaz Teorema T 10.4.4.) Uzećemo bazis $\{|\, m\rangle_1 \mid \forall m\}$ u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ tako da mu se prvih N vektora podudara sa vektorima $|\, n_1\rangle, \ldots, |\, n_N\rangle$ zadatim u Teoremu T 10.4.4. Izračunaćemo $\hat{\rho}_1$ Slater-ove determinante $|\, n_1 < \ldots < n_N\rangle$ u reprezentaciji bazisa u $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$ koji dobijamo direktnim množenjem pomenutog bazisa u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ sa njegovim izomorfnim bazisima u $\mathcal{H}_2^{(u)}, \mathcal{H}_3^{(u)}, \ldots \mathcal{H}_N^{(u)}$ (naravno, reč je o izomorfizmima $J_{j\leftarrow 1},\ j = 2, 3, \ldots, N$ — videti § 9.3.4 — koji leže u osnovi formalizma identičnih čestica). Imamo $\langle m_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid m_1' \,\rangle = \sum_{m_2} \sum_{m_3} \ldots \sum_{m_N} \langle\, m_1, m_2, \ldots, m_N \mid n_1 < \ldots < n_N\rangle\langle\, n_1 < \ldots < n_N \mid m_1', m_2, \ldots, m_N\rangle$, kao što sledi iz (10.4.18). Eksplicitno, koristeći se definicijom Slater-ove determinante (9.4.7) i (9.3.17), sledi:

$$\langle m_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid m_1' \,\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{m_2} \sum_{m_3} \cdots \sum_{m_N} \sum_{p \in S_N} \sum_{p' \in S_N} (-1)^p (-1)^{p'} \langle\, m_1, m_2, \ldots, m_N \mid n_{p_1^{-1}}, n_{p_2^{-1}}, \ldots, n_{p_N^{-1}} \rangle$$
$$\langle\, n_{p_1'^{-1}}, n_{p_2'^{-1}}, \ldots, n_{p_N'^{-1}} \mid m_1', m_2, \ldots, m_N\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{p \in S_N} \sum_{p' \in S_N} \sum_{m_2} \sum_{m_3} \cdots \sum_{m_N} (-1)^p (-1)^{p'}$$
$$\langle\, m_1 \mid n_{p_1^{-1}}\rangle\langle\, n_{p_1'^{-1}} \mid m_1'\rangle\langle\, m_2 \mid n_{p_2^{-1}}\rangle\langle\, n_{p_2'^{-1}} \mid m_2\rangle \ldots \langle\, m_N \mid n_{p_N^{-1}}\rangle\langle\, n_{p_N'^{-1}} \mid m_N\rangle. \quad (10.4.49)$$

U poslednjem koraku iskoristili smo okolnost što su N-čestični ketovi i braovi u kojima se pojavljuju zapete nekorelisani, te je skalarni proizvod kompozitnih vektora jednak proizvodu skalarnih proizvoda jednočestičnih faktora. Preuredili smo redosled faktora na kraju da bi bio pogodan za narednu diskusiju.

Zaključak 1. Pošto $|\, n_{p_1^{-1}} \,\rangle$ i $|\, n_{p_1'^{-1}} \,\rangle$ pripadaju skupu vektora $\{|\, n_1 \,\rangle, \ldots, |\, n_N \,\rangle\}$, sigurno $\langle m_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid m_1' \,\rangle = 0$, osim ako i $|\, m_1 \,\rangle$ i $|\, m_1' \,\rangle$ pripadaju istom skupu vektora (inače, jedan od prva dva faktora u svakom sabirku na desnoj strani od (10.4.49) daje nulu).

[10.4.9] Pošto je N fiksirano, moguće je ograničiti se na takve $\hat{P}_1$, koji jesu multipletski zatvoreni i samo pod tim uslovom tražiti najniže nivoe $\epsilon_{nk\lambda}$. Tako će se formalno uvek dobiti rotaciono simetrično rešenje. Ali, gledano iz varijacionog skupa svih $\hat{P}_1$ (bez rotacionog ograničenja), u ovakvom slučaju je obično jasno da smo daleko iznad energije osnovnog stanja.

Zaključak 2. Da ne bi nijedan od preostalih vektora na desnoj strani od (10.4.49) bio nula u svakom sabirku, moramo imati $| n_{p_2'^{-1}} \rangle = | n_{p_2^{-1}} \rangle, \ldots, | n_{p_N'^{-1}} \rangle = | n_{p_N^{-1}} \rangle$, što iziskuje i $| n_{p_1'^{-1}} \rangle = | n_{p_1^{-1}} \rangle$, jer i permutacija $\hat{P}$ i $\hat{P}'$ deluju na isti vektor $| n_1 \rangle | n_2 \rangle \cdots | n_N \rangle$, te ne možemo dobiti različito stanje samo u prvom faktoru. Onda $p'^{-1} = p^{-1}$, tj. $p' = p$, kao potreban uslov za sabirke koji ne daju nulu na desnoj strani od (10.4.49). Prva dva faktora sad pokazuju da ćemo ipak imati uvek nulu osim ako $m_1 = m_1'$. Dakle, naša matrica $\hat{\rho}_1$ je dijagonalna.

Zaključak 3. Najzad, izračunajmo dijagonalni element $\langle m_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid m_1 \rangle$, $| m_1 \rangle \in \{| n_1 \rangle, | n_2 \rangle, \ldots | n_N \rangle\}$. Zbog pomenutog $p' = p$, imamo samo jednu sumu po permutacijama, a $(-1)^p(-1)^{p'} = +1$. Neka je $\overline{p}$ jedna (arbitrarna) fiksirana permutacija takva da $| n_{\overline{p}_1^{-1}} \rangle = | m_1 \rangle$, a p'' neka je tekuća permutacija koja ostavlja 1 invarijantnim (tj. $p_1'' = 1$).Onda p'' teče po podgrupi od S_N, koja je izomorfna sa S_{N-1} i, prema tome, ima $(N-1)!$ elemenata. Lako je videti da samo permutacije vida $p''\overline{p}$ ne daju nulu (inače $\langle m_1 \mid n_{p_1^{-1}} \rangle = 0$). Od (10.4.49) preostaje

$$\langle m_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid m_1 \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{p'' \in S_{N-1}} \sum_{m_2} \sum_{m_3} \cdots \sum_{m_N} |\langle m_2 \mid n_{(p''\overline{p})_2^{-1}} \rangle|^2 \ldots |\langle m_N \mid n_{(p''\overline{p})_N^{-1}} \rangle|^2 .$$

Za fiksirano p'', u svakoj sumi $\sum_{m_2}$, $\sum_{m_3} \cdots \sum_{m_N}$ tačno po jedan sabirak ne daje nulu (nego daje 1), tako da

$$\langle m_1 \mid \hat{\rho}_1 \mid m_1 \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{p'' \in S_{N-1}} 1 = \frac{1}{N!}(N-1)! = \frac{1}{N}.$$

Odmah se vidi da operator $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mid n_i \rangle_1 \langle n_i \mid_1$ ima sve matrične elemente iste kao što smo dobili u gornjim zakjuččima. *Q. E. D.*

10.4.11 * Dodatak 2 — Izračunavanje dvočestičnog statističkog operatora Slater-ove determinante

Sada ćemo dokazati Teorem T 10.4.5.

Poći ćemo od istog bazisa i računaćemo u istoj raprezentaciji kao u dokazu Teorema T 10.4.4. Iz (10.4.19) se dobija (analogno kao (10.4.49) u prethodnom paragrafu):

$$\langle m_1, m_2 \mid \hat{\rho}_{12} \mid m_1', m_2' \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{p \in S_N} \sum_{p' \in S_N} \sum_{m_3} \sum_{m_4} \cdots \sum_{m_N} (-1)^p (-1)^{p'} \cdot$$
$$\cdot \langle m_1 \mid n_{p_1^{-1}} \rangle \langle n_{p_1'^{-1}} \mid m_1' \rangle \langle m_2 \mid n_{p_2^{-1}} \rangle \langle n_{p_2'^{-1}} \mid m_2' \rangle \cdots \langle m_N \mid n_{p_N^{-1}} \rangle \langle n_{p_N'^{-1}} \mid m_N \rangle \quad (10.4.50)$$

Zaključak 1. Iz prva četiri faktora vidimo da je traženi matrični element nula, osim ako $| m_1 \rangle, | m_1' \rangle, | m_2 \rangle, | m_2' \rangle \in \{| n_1 \rangle, \ldots, | n_N \rangle\}$.

Zaključak 2. Iz ostalih vektora sledi da je za različitost od nule matričnog elementa potrebno da važi
$| n_{p_3^{-1}} \rangle = | n_{p_3'^{-1}} \rangle$,..., $| n_{p_N^{-1}} \rangle = | n_{p_N'^{-1}} \rangle$. Odavde sledi jednakost skupova $\{| n_{p_1^{-1}} \rangle, | n_{p_2^{-1}} \rangle\} = \{| n_{p_1'^{-1}} \rangle, | n_{p_2'^{-1}} \rangle\}$, što znači da moramo imati ili $| n_{p_1^{-1}} \rangle = | n_{p_1'^{-1}} \rangle$ i $| n_{p_2^{-1}} \rangle = | n_{p_2'^{-1}} \rangle$, ili $| n_{p_1^{-1}} \rangle = | n_{p_2'^{-1}} \rangle$ i $| n_{p_2^{-1}} \rangle = | n_{p_1'^{-1}} \rangle$. Znači, iz $\sum_{p' \in S_N}$ možemo zadržati samo dva sabirka: $p' = p$ i $p' = p_{12}p$, gde je p_{12} transpozicija prve i druge čestice. Dobićemo dijagonalne matrične elemente $\langle m_1, m_2 \mid \hat{\rho}_{12} \mid m_1, m_2 \rangle$ i jedino $\langle m_1, m_2 \mid \hat{\rho}_{12} \mid m_2, m_1 \rangle$ kao nenulte vandijagonalne matrične elamente. Dijagonalnom elementu doprinosi samo $p' = p$, a pomenutom vandijagonalnom samo $p' = p_{12}p$ (što daje $(-1)^p(-1)^{p'} = 1$, odnosno $(-1)^p(-1)^{p'} = -1$).

Zaključak 3. Za fiksirane $|\, m_1 \rangle$, $|\, m_1' \rangle$, $|\, m_2 \rangle$, $|\, m_2' \rangle$ u sumi $\sum_{p\in S_N}$ možemo se ograničiti na permutacije koje permutuju samo čestice $3,\ldots,N$, a čestice 1 i 2 ne menjaju (podgrupa S_{N-2} sa $(N-2)!$ elemenata). Za fiksirano p i p' u svakoj sumi $\sum_{m_3}$, $\sum_{m_4},\ldots,\sum_{m_N}$ doprinosi tačno jedan sabirak. Stoga,

$$\langle m_1, m_2 \mid \hat{\rho}_{12} \mid m_1, m_2 \rangle = \frac{1}{N!}\sum_{p\in S_{N-2}} 1 = \frac{1}{N!}(N-2)! = \frac{1}{N(N-1)}; \qquad (10.4.51a)$$

$$\langle m_1, m_2 \mid \hat{\rho}_{12} \mid m_2, m_1 \rangle = \frac{1}{N!}\sum_{p\in S_{N-2}} (-1) = \frac{1}{N!}(N-2)! = -\frac{1}{N(N-1)}. \qquad (10.4.51b)$$

S druge strane, desna strana od (10.4.21) daje $\langle m_1, m_2 \mid \frac{2N}{N(N-1)}\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\frac{1}{2}(\hat{I}_{12}-\hat{E}_{12}) \mid m_1', m_2' \rangle = \frac{N}{N-1}\frac{1}{N^2}\delta_{m_1,m_1'}\delta_{m_2,m_2'} - \frac{N}{N-1}\frac{1}{N^2}\delta_{m_1,m_2'}\delta_{m_2,m_1'} = \frac{1}{N(N-1)}(\delta_{m_1,m_1'}\delta_{m_2,m_2'} - \delta_{m_1,m_2'}\delta_{m_2,m_1'})$, i to samo ako $|\, m_1 \rangle, |\, m_1' \rangle, |\, m_2 \rangle, |\, m_2' \rangle \in \{|\, n_1 \rangle, \ldots, |\, n_N \rangle\}$, ostali matrični elementi su nula.

Glava 11

OSNOVI DRUGE KVANTIZACIJE

11.1 Sistemi identičnih fermiona

U ovom odeljku izgradićemo kvantno-mehanički formalizam tzv. druge kvantizacije za opisivanje sistema identičnih fermiona. Tu se naporedo proučavaju sistemi sa brojevima čestica $N = 0, 1, 2, ...$ Baš na račun ovako široko zamišljenog prostora stanja uspećemo da veoma složeni Pauli-jev princip inkorporiramo u proste algebarske relacije novih operatora druge kvantizacije (kreacionih i anihilacionih operatora), na kojima počiva ceo pomenuti formalizam.

Na kraju odeljka dati su veoma teški dokazi osnovnih teorema, koji se odnose na prenošenje aditivnih operatora iz prve u drugu kvantizaciju. Ovi dokazi (obično se izostavljaju) su prvenstveno namenjeni čitaocima koji će da koriste drugu kvantizaciju u svom teorijskom istraživačkom radu. Za njih je korisno da prouče jedan primer detaljnog rezonovanja sa operatorima druge kvantizacije (i sa permutacionim operatorima u prvoj kvantizaciji).

11.1.1 Prostor druge kvantizacije za fermione

Imamo u vidu jedan određeni fermion, na primer elektron (može biti i proton ili neutron ili nukleon) i uzimamo u obzir sva moguća stanja svih mogućih N-identično-fermionskih sistema, pri čemu $N \doteq 0, 1, 2, ...$ (tačka znači "može biti").

Za dva, tri ili više fermiona (nećemo ponavljati "identičnih") znamo iz postulata VIII b) (§ 9.3.6) da je prostor stanja *antisimetrični potprostor* $\mathcal{V}_a^{(N)} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{V}_a \subset \mathcal{H}_1^{(u)} \otimes ... \otimes \mathcal{H}_N^{(u)}$. Za jedan fermion prostor stanja je, naravno, sam $\mathcal{H}_1^{(u)} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{V}_a^{(N=1)}$. Za opisivanje nula fermiona, tj. stanja u kome nema ni jednog od naših fermiona, uvešćemo jedno jedino stanje, tzv. *vakuum* i obeležićemo ga sa $| 0 \rangle$. Obratiti pažnju da je to relativan pojam, odnosi se na određenu vrstu fermiona. ($| 0 \rangle$ nije nulti vektor, nego je $\langle 0 | 0 \rangle = 1$!) Pravac (jedno-dimenzionalni potprostor) koji $| 0 \rangle$ obrazuje obeležićemo sa $[\mathcal{H}_1^{(u)}]^0 = \mathcal{V}_a^{(N=0)}$ (u reprezentaciji, u bazisu $\{| 0 \rangle\}$ $\mathcal{V}_a^{(0)}$ prelazi u $\mathbb{C}^1$). Na taj način N fermiona opisujemo u prostoru stanja $\mathcal{V}_a^{(N)}$ koji je N-ti antisimetrični stepen od $\mathcal{H}_1^{(u)}, N = 0, 1, 2, ...$

Prostor stanja koji dozvoljava proizvoljan broj fermiona, $n \doteq 0, 1, 2, ...$, će biti *ortogonalni zbir* svih navedenih potprostora

$$\boxed{\mathcal{H}_{II}^{f} \stackrel{\text{def}}{=} \oplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{V}_a^{(N)}}, \quad \mathcal{V}_a^{(0)} \stackrel{\text{def}}{=} [\mathcal{H}_1^{(u)}]^0, \quad \mathcal{V}_a^{(1)} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_1^{(u)}, \qquad (11.1.1a,b,c)$$

$\mathcal{H}^f_{II}$ se naziva *prostorom druge kvantizacije* ili *Fock-ovim* (Fok) *prostorom* za dotični fermion.

Čitaocu je bez sumnje jasno da $\mathcal{H}^f_{II}$ sadrži i stanja (to znači čista stanja!) čiji broj čestica nema određenu, tj. oštru vrednost; drugim rečima, u kojima $\Delta^2 N = \overline{N^2} - \overline{N}^2 > 0$. Međutim, u nerelativističkoj kvantnoj fizici masenih čestica (tj. čestica sa pozitivnom masom mirovanja) nisu poznati aspekti ponašanja, tj. opservable ili merenja koja bi bila nekompatibilna sa brojem čestica i koja bi omogućila preparaciju čistog ansambla fermionskih sistema sa neodređenim brojem čestica. Drugim rečima, pomenuta stanja (koja nisu elementi pojedinih sabiraka u (11.1.1a), nego su superpozicije više takvih) *nemaju fizičkog smisla*. Laboratorijski se obično ne priprema ansambl fizičkih sistema sa nula fermiona, tj. vakuum je obično bez fizičkog smisla (što nije slučaj u relativističkoj kvantnoj mehanici ili kvantnoj teoriji polja !). Dakle, sva stanja u kojima N nema određenu vrednost $1, 2, \ldots$ služe samo kao *matematičko upotpunjavanje formalizma*. Zahvaljujući baš matematički kompletnoj i zaokrugljenoj formi (11.1.1a) prostora $\mathcal{H}^f_{II}$ matematički aparat ili formalizam druge kvantizacije je neobično moćan i praktičan.

11.1.2 Bazis brojeva popunjenosti

Čim je definisan prostor stanja, kvantno-mehanički formalizam po pravilu zahteva uočavanje najpogodnijih bazisa ili reprezentacija. Stoga se pitamo kavim ćemo se bazisima koristiti u $\mathcal{H}^f_{II}$.

Odgovor na postavljeno pitanje u stvari je već dobijen u T 9.4.2. Pošli smo od *proizvoljnog jednočestičnog bazisa* $\{|\, n\,\rangle_1 | \forall n\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ i izgradili bazis od Slater-ovih determinanti u $\mathcal{V}_a^{(N)}$. Kada ovaj rezultat prenesemo u $\mathcal{H}^f_{II}$ onda traženi bazis glasi:

$$\{|\, n_1 < n_2 < \ldots < n_N\,\rangle \mid \text{sve kombinacije bez ponavljanja za dato } N = 0, 1, 2 \ldots\} \subset \mathcal{H}^f_{II}, \qquad (11.1.2a)$$

gde smo, naravno uključili podbazise

$$N = 1: \quad \{|\, n\,\rangle_1 | \forall n\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}, \quad N = 0: \{|\, 0\,\rangle\}. \qquad (11.1.2b,c)$$

Bazis (11.1.2a) je po sadržini, tj. po vrsti vektora od kojih se sastoji, sasvim prilagođen zahtevu najprostijeg opisivanja fermionskih sistema. Ali samu formu zapisivanja bazisnih vektora ćemo još morati da doradimo.

Kao što smo pretpostavili u T 9.4.2, vrednosti jednočestičnog kvantnog broja n su potpuno uređene: $n_1 < n_2 < \ldots$ Biće praktično da prosto pišemo $1 < 2 < 3 \ldots$, tj. da n zamenimo sa m čije su vrednosti prirodni brojevi. Drugim rečima, bazis $\{|\, n\,\rangle | \forall n\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ prepisujemo u vidu

$$\{|\, m\,\rangle | m = 1, 2, \ldots\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}. \qquad (11.1.3)$$

Lako je videti da je svaka Slater-ova determinanta u (11.1.2a) karakterisana podacima koji kazuju koja su od stanja $|\, m\,\rangle$ *popunjena*, tj. prisutna u dotičnoj Slater-ovoj deteminanti, a koja nisu. To možemo izraziti funkcijom ν_m koja uzima vrednosti 1 ili 0, pri čemu $\nu_m = 1$ znači da je $|\, m\,\rangle$ popunjeno, a $\nu_m = 0$ znači da stanje $|\, m'\,\rangle$ nije popunjeno. Pri tome, očigledno, $\sum_{m=1}^{\infty} \nu_m = N < \infty$. Imajući u vidu ovakve funkcije ν_m, vektore bazisa (11.1.2a) (i sam bazis) možemo da prepišemo na sledeći jedinstven način:

$$\{|\, \nu_1, \nu_2, \ldots\,\rangle \mid \text{sve funkcije } \nu_{\mathrm{m}} \text{ za koje } \sum_{m=1}^{\infty} \nu_m < \infty\} \subset \mathcal{H}^f_{II} \qquad (11.1.4)$$

Bazis (11.1.4) (koji se sastoji od istih Slater-ovih determinanti, ali pogodnije napisanih) naziva se *bazis brojeva popunjenosti*, jer su ν_m po svom fizičkom smislu *brojevi popunjenosti*. Reprezentacija koju (11.1.4) definiše naziva se *reprezentacijom brojeva popunjenosti*.

Zadatak 11.1.1 Zašto se u (11.1.4) ne pojavljuju stanja $\mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle$ sa $\sum_{m=1}^{\infty} \nu_m = \infty$? Šta bi ona značila fizički? Kako se vidi da takva stanja ne pripadaju $\mathcal{H}_{II}^f$?

Zadatak 11.1.2 Napisati eksplicitno vakuum i jednofermionske bazisne vektore iz (11.1.4).

Zadatak 11.1.3 Napisati kako se reprezentuje proizvoljan vektor $\mid \psi \rangle \in \mathcal{H}_{II}^f$ u bazisu brojeva popunjenosti.

Zadatak 11.1.4 Kako se u sistemima brojeva (to su uopštenja od "brojnih kolona") koja se pojavljuju u odgovoru na prethodni Zadatak razlikuju stanja sa oštrom vrednošću broja čestica od ostalih stanja?

11.1.3 Kreacioni i anihilacioni operatori

Bazis brojeva popunjenosti (11.1.4) nije krajnji domet formalizma druge kvantizacije za fermione, već pre samo njegova odskočna daska. Ali i dalje će se raditi o istim sadržinama, a promena će se odnositi na formu entiteta.

Izabravši jednofermionski bazis (11.1.3) i konstruisavši pomoću njega bazis brojeva popunjenosti (11.1.4), možemo da definišemo tzv. *anihilacione operatore* a_m kao linearne operatore koji na sledeći način deluju na bazisni vektor:

$$\boxed{a_m \mid \nu_1, ..., \nu_m, ... \rangle = \nu_m (-1)^{b(m)} \mid \nu_1, ..., \nu_m - 1, ... \rangle, \quad m = 1, 2, ...}, \tag{11.1.5a}$$

gde je $b(m)$ broj popunjenih stanja u $\mid \nu_1, ..., \nu_m, ... \rangle$ koja su ispred $\mid m \rangle$, tj.

$$b(m) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{m'=1}^{m-1} \nu_{m'}. \tag{11.1.5b}$$

Treba zapaziti da je $b(m)$ ceo broj koji zavisi kako od vrednosti m jednofermionskog kvantnog broja tako i od Slater-ove determinante $\mid \nu_1, ..., \nu_m, ... \rangle$, a ova druga zavisnost nije obuhvaćena simbolikom (imamo nekompletnost simbola radi jednostavnosti).

Pošto je $\mid \nu_1, ..., \nu_m, ... \rangle$ proizvoljni vektor bazisa (11.1.4) može biti $\nu_m = 0$ i, prema tome, vektor $\mid \nu_1, ..., \nu_m - 1, ... \rangle$ nedefinisan. Uprkos tome, (11.1.5) dobro definiše a_m, jer bez obzira koji je vektor $\mid \nu_1, ..., \nu_m - 1, ... \rangle$, faktor ν_m ionako daje na desnoj strani od (11.1.5) nulti vektor (zbog $\nu_m = 0$).

Termin "anihilacioni" operator potiče otud što za $\nu_m = 1$ (na levoj strani (11.1.5)) dobijamo $\nu'_m = \nu_m - 1 = 0$ na desnoj strani, tj. kao da se jednofermionsko stanje $\mid m \rangle$ anihiliralo, odstranilo iz $\mid \nu_1, ..., \nu_m, ... \rangle$.

U bazisu brojeva popunjenosti (11.1.4) anihilacioni operator a_m se reprezentuje matricom čiji su elementi

$$\langle \nu'_1, \nu'_2, ... \mid a_m \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle = \nu_m (-1)^{b(m)} \delta_{\nu'_1, \nu_1} \delta_{\nu'_2, \nu_2} ... \delta_{\nu'_m, \nu_m - 1} ... \tag{11.1.6}$$

Adjungovani operator od a_m piše se $a_m^\dagger$ i naziva *kreacionim operatorom.* Pošto se na matričnom jeziku adjungovanje sastoji iz kompleksne konjugacije i transponovanja (tj. uzajamne zamene uloge vrsta i kolona), iz (11.1.6) sledi

$$\langle \nu_1', \nu_2', ... \mid a_m^\dagger \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle = \nu_m'(-1)^{\sum_{m'=1}^{m-1} \nu_m'} \delta_{\nu_1',\nu_1} ... \delta_{\nu_m'-1,\nu_m} ... = (1-\nu_m)(-1)^{\sum_{m'=1}^{m-1} \nu_m'} \delta_{\nu_1',\nu_1} ... \delta_{\nu_m'-1,\nu_m} ... \tag{11.1.7}$$

Poslednji korak je rezultat sledećeg rezonovanja: ako je matrični element ionako nula, onda nije važno što faktori nisu jednaki (na primer suma po $\nu_{m'}'$ prelazi u sumu po $\nu_{m'}$), a kad je matrični element nejednak nuli, onda ti različiti faktori upravo daju i obezbeđuju isto. Tako $\nu_m' \delta_{\nu_m'-1,\nu_m}$ daje 1 samo ako $\nu_m' = 1$ i $\nu_m = 0$, inače daje nulu; a isto važi i za $(1-\nu_m)\delta_{\nu_m',\nu_m+1}$.

Iz (11.1.7) se vidi da kreacioni operatori imaju sledeće delovanje:

$$\boxed{a_m^\dagger \mid \nu_1, ..., \nu_m, ... \rangle = (1-\nu_m)(-1)^{b(m)} \mid \nu_1, ..., \nu_m + 1, ... \rangle}. \tag{11.1.8}$$

Termin "kreacioni" ukazuje na činjenicu da $a_m^\dagger$ kada god pri delovanju na bazisni vektor ne daje nulti vektor, a to je slučaj kad $\mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle$ ne sadrži $\mid m \rangle$ onda "kreira" stanje $\mid m \rangle$, tj. dodaje ga na $\mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle$ (ali tako da opet rezultuje Slater-ova determinanta).

Zadatak 11.1.5 Dokazati da nijedan a_m i nijedan $a_m^\dagger$ nije ni hermitski ni unitarni operator.

Podsetimo se da je antikomutator dva operatora $\hat{A}$ i $\hat{B}$, tj. $[\hat{A}, \hat{B}]_+$, definisan sa $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$, te "antikomutiranje" $[\hat{A}, \hat{B}]_+ = 0$ znači $\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A}$, tj. izmenu poretka operatora koja se plaća množenjem sa minus jedan.

Anihilacioni i kreacioni operatori zadovoljavaju sledeće tzv. *antikomutacione relacije*:

$$\boxed{[\, a_m, a_{m'} \,]_+ = 0 = [\, a_m^\dagger, a_{m'}^\dagger \,]_+, \quad [a_m, a_{m'}^\dagger]_+ = \delta_{mm'}, \forall m, m'}. \tag{11.1.9a,b,c}$$

Ove relacije igraju najvažniju ulogu u formalizmu druge kvantizacije za fermione.

Zadatak 11.1.6 Dokazati (11.1.9).

Zadatak 11.1.7 Pokazati da su i kreacioni operatori $a_m^\dagger$ i anihilacioni operatori a_m nilpotentni, tj. da im je kvadrat (ili bilo koji viši stepen) jednak nuli.

U mnogim računima sa fermionskim kreacionim i anihilacionim operatorima korisno je imati na umu da su a_m i $a_m^\dagger$ *neprekidni operatori.* Nećemo to dokazivati[11.1.1].

11.1.4 Operatori brojeva popunjenosti i operator broja fermiona

Pođimo opet od jednofermionskog bazisa (11.1.3) i uzmimo N proizvoljnih različitih kreacionih operatora $a_{m_1}^\dagger, a_{m_2}^\dagger, ..., a_{m_N}^\dagger$ i to tako da $m_1 < m_2 < ... < m_N$. Formirajmo vektor

[11.1.1]Što se tiče matematički rigoroznog tretmana, videti G.G. Emch, *Algebraic Methods in Statictical Mechanics and Quantum Field Theory*, Wilay-Interscience, London, 1972, glava 1, odeljak c.

$a^\dagger_{m_1} a^\dagger_{m_2} ... a^\dagger_{m_N} \mid 0 \rangle \in \mathcal{H}^f_{II}$ i izračunajmo njegove koeficijente razvoja po vektorima bazisa brojeva popunjenosti (11.1.4).

$$\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid a^\dagger_{m_1} ... a^\dagger_{m_N} \mid 0 \rangle = \tag{11.1.10}$$
$$\nu_{m_1} (-1)^{b_1(m_1)} \nu_{m_2} (-1)^{b_2(m_2)} ... \nu_{m_N} (-1)^{b_N(m_N)} \langle \nu_1, ... \nu_{m_1} - 1, ... \nu_{m_N} - 1, ... \mid 0 \rangle.$$

Treba imati u vidu da je $\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid a^\dagger_{m_1}$ bra od keta $a_{m_1} \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle$, itd. Samo se $b_1(m_1)$ izračunava u $\mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle$, $b_2(m_2)$ se izračunava u $\mid \nu_1, ... \nu_{m_1} - 1, ... \rangle$ itd.

Iz (11.1.10) se može zaključiti da $a^\dagger_{m_1} ... a^\dagger_{m_N} \mid 0 \rangle$ ima razvojne koeficijente nula po svim vektorima bazisa, osim po jednom jedinom i to onom u kojem su baš $m_1, m_2, ..., m_N$ popunjeni i ni jedno drugo stanje nije popunjeno. Ako pretpostavimo da je $\mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle$ taj bazisni vektor, onda usled $m_1 < m_2 < ... < m_N$, $(-1)^{b(m_1)} = 1$, isto tako $(-1)^{b_2(m_2)} = 1$, jer je u $\mid \nu_1, ... \nu_{m_1} - 1, ... \rangle$ $\mid m_2 \rangle$ prvo popunjeno stanje, itd. Znači, $a^\dagger_{m_1} ... a^\dagger_{m_N} \mid 0 \rangle$ je upravo jednak dotičnom bazisnom vektoru.

Tako smo zaključili da se bazis brojeva popunjenosti (11.1.4) može drugačije napisati u sledećem vidu:

$$\boxed{\{ a^\dagger_{m_1} ... a^\dagger_{m_N} \mid 0 \rangle \mid \text{sve kombinacije bez ponavljanja } m_1 < ... < m_N ; N = 0, 1, 2, ... \} \subset \mathcal{H}^f_{II}}. \tag{11.1.11}$$

Zadatak 11.1.8 Prepisati definicionu jednakost (11.1.5) za anihilacioni operator pomoću vektora iz (11.1.11) i svesti je na identitet. Tako se vidi da faktor $(-1)^{b(m)}$ potiče od (11.1.9c).

Zadatak 11.1.9 Pokazati da u $\mathcal{H}^f_{II}$ postoji jedan i samo jedan (s tačnošću do brojnog faktora) vektor $\mid \psi \rangle$ koji zadovoljava $a_m \mid \psi \rangle = 0$, $\forall m$ i da je on (s tačnošću do brojnog množioca) jednak vakuumu $\mid 0 \rangle$. Stoga se vakuum često definiše zahtevom

$$a_m \mid 0 \rangle = 0, \quad m = 1, 2, ... \tag{11.1.12}$$

uz neke dodatne zahteve (videti niže, § 11.1.8 i § 11.1.9).

Treba zapaziti da je vakuum $\mid 0 \rangle$ jedan te isti za sve moguće jednofermionske bazise $\{ \mid m \rangle \mid m = 1, 2, ... \} \subset \mathcal{H}^{(u)}_1$.

Zadatak 11.1.10 Pokazati da je za svako m operator $a^\dagger_m a_m$ projektor, da su vektori bazisa (11.1.11) njegovi svojstveni vektori i da odgovaraju svojstvenoj vrednosti 1 ili 0 prema tome da li je stanje m popunjeno ili ne u dotičnom vektoru. Na jeziku vektora bazisa brojeva popunjenosti (11.1.4):

$$a^\dagger_m a_m \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle = \nu_m \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle, \quad m = 1, 2, ... \tag{11.1.13}$$

Zadatak 11.1.11 Pokazati da je projektorski niz $a^\dagger_m a_m$, $m = 1, 2, ...$ *potpuni skup kompatibilnih opservabli* u $\mathcal{H}^f_{II}$ sa ν_m, $m = 1, 2, ...$ kao odgovarajućim potpunim skupom kvantnih brojeva (ili svojstvenih vrednosti). To daje drugi pogled na vektore bazisa (11.1.4).

Operatori $a^\dagger_m a_m$ nazivaju se *operatorima brojeva popunjenosti*, a operator

$$\hat{N} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{m=1}^{\infty} a^\dagger_m a_m \tag{11.1.14}$$

naziva se *operatorom broja čestica*, jer

$$\hat{N} \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle = (\sum_{m=1}^{\infty} \nu_m) \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle = N \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle. \tag{11.1.15}$$

Zadatak 11.1.12 Pokazati da $a^\dagger_m$ i a_m nisu normalni operatori.

11.1.5 Transformacione osobine kreacionih i anihilacionih operatora

Kao što smo stalno naglašavali, sve entitete ovog odeljka određuje unapred odabrani jednofermionski bazis $\{| m \rangle | m = 1, 2, ...\}$. Postavlja se pitanje kako će da glasi *transformaciona teorija*, tj. kakve će promene reizbor jednofermionskog bazisa izazivati u bazisu (11.1.11) i u samim operatorima $a_m^\dagger$ i a_m.

Lema 11.1.1 *Neka je u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ zadato razvijanje novog bazisa po starom:*

$$\boxed{| q \rangle = \sum_{m=1}^{\infty} U_{qm} \mid m \rangle}, q = 1, 2, ... \tag{11.1.16}$$

Usled (11.1.16) imamo sledeće razvijanje novog bazisa tipa (11.1.11) po starom:

$$a_{q_1}^\dagger ... a_{q_N}^\dagger \mid 0 \rangle = \sum_{m_1 < ... < m_N} (\sum_{p \in S_N} (-1)^p U_{q_1 m_{p_1}} ... U_{q_N m_{p_N}}) a_{m_1}^\dagger ... a_{m_N}^\dagger \mid 0 \rangle. \tag{11.1.17}$$

Dokaz: $LS = a_{q_1}^\dagger ... a_{q_N}^\dagger \mid 0 \rangle = \mid q_1 < ... < q_N \rangle$, te na osnovu (9.4.7) imamo $LS = \sqrt{N!} \hat{A} \mid q_1 \rangle ... \mid q_N \rangle$. Zamenjujući ovde (11.1.16), dolazimo do $LS = \sum_{m_1=1}^{\infty} ... \sum_{m_N=1}^{\infty} U_{q_1 m_1} ... U_{q_N m_N} \sqrt{N!} \hat{A} \mid m_1 \rangle ... \mid m_N \rangle$. Zbog antisimetrizatora $\hat{A}$ vektori $\mid m_1 \rangle \mid m_2 \rangle ... \mid m_N \rangle$ sa ponavljanjem (istog jednofermionskog stanja) ne daju nenulti doprinos (uporediti L1-9.4.2). Lako je videti da preostale sabirke možemo pogodnije prebrojati sledećim zbirovima LS:

$$LS = \sum_{m_1 < ... < m_N} \sum_{p \in S_N} U_{q_1 m_{p_1}} ... U_{q_N m_{p_N}} \sqrt{N!} \hat{A} \mid m_{p_1} \rangle ... \mid m_{p_N} \rangle =$$

$$\sum_{m_1 < ... < m_N} \sum_{p \in S_N} U_{q_1 m_{p_1}} ... U_{q_N m_{p_N}} \sqrt{N!} \hat{A} \hat{P}^{-1} \mid m_1 \rangle ... \mid m_N \rangle.$$

Zbog $\hat{A} \hat{P}^{-1} = (-1)^{p^{-1}} \hat{A} = (-1)^p \hat{A}$ (uporediti dokaz L 9.4.1) i definicije Slater-ove determinante (9.4.7), najzad, sledi:

$$LS = \sum_{m_1 < ... < m_N} (\sum_{p \in S_N} (-1)^p U_{q_1 m_{p_1}} ... U_{q_N m_{p_N}}) \mid m_1 < ... < m_N \rangle = DS$$

od (11.1.17). *Q. E. D.*

Lema 11.1.2 *Pod pretpostavkom (11.1.16), razvijanje (11.1.17) može se napisati i u vidu*

$$a_{q_1}^\dagger ... a_{q_N}^\dagger \mid 0 \rangle = \sum_{m_1=1}^{\infty} ... \sum_{m_N=1}^{\infty} U_{q_1 m_1} ... U_{q_N m_N} a_{m_1}^\dagger ... a_{m_N}^\dagger \mid 0 \rangle. \tag{11.1.18}$$

Dokaz: Zbog nilpotentnosti kreacionih operatora na desnoj strani otpadaju svi članovi sa ponavljanjem iste vrednosti kvantnog broja. Stoga $DS = \sum_{m_1 < ... < m_N} \sum_{p \in S_N} U_{q_1 m_{p_1}} ... U_{q_N m_{p_N}} a_{m_{p_1}}^\dagger ... a_{m_{p_N}}^\dagger \mid 0 \rangle$. Najzad, koristeći se antikomutiranjem kreacionih operatora, dolazimo do: $DS = \sum_{m_1 < ... < m_N} (\sum_{p \in S_N} (-1)^p U_{q_1 m_{p_1}} ... U_{q_N m_{p_N}}) a_{m_1}^\dagger ... a_{m_N}^\dagger \mid 0 \rangle$. Iz (11.1.17) onda sledi $DS = LS$ od (11.1.18). *Q. E. D.*

Razvijanje (11.1.18) odlikuje se redundancijom (suvišnošću), jer ne samo da su prisutne nule (zbog ponavljanja kreacionih operatora na desnoj strani), već se i nenulti vektori pojavljuju $N!$ puta, sa svim mogućim permutacijama vrednosti kvantnog broja. Ali baš na račun ove redundancije dobija se praktičniji vid, koji je ponekad (kao u dokazu sledećeg teorema) veoma koristan.

Teorem 11.1.1 *Kreacioni operatori se transformišu kao ketovi, a anihilacioni kao braovi, tj. (11.1.16) indukuje sledeće transformacije*

$$\boxed{a_q^\dagger = \sum_{m=1}^{\infty} U_{qm} a_m^\dagger, \quad a_q = \sum_{m=1}^{\infty} U_{qm}^* a_m, \quad q = 1,2,...} \tag{11.1.19a,b}$$

Dokaz: Dovoljno je dokazati (11.1.19a), a (11.1.19b) onda sledi adjungovanjem. Primenićemo obe strane od (11.1.19a) na proizvoljni vektor bazisa tipa (11.1.11), koji definiše novi jednofermionski bazis $\{|\, q\,\rangle | q = 1,2,...\}$. Leva strana od (11.1.19a) daje:

$$LS \stackrel{\text{def}}{=} a_q^\dagger (a_{q_1}^\dagger ... a_{q_N}^\dagger \mid 0\,\rangle) = \begin{cases} 0, & \text{ako } q \in q_1, ..., q_N \\ (-1)^{b(q)} a_{q_1}^\dagger ... a_q^\dagger ... a_{q_N} \mid 0\,\rangle, & \text{inače.} \end{cases} \tag{11.1.20}$$

(postigli smo $q_1 < ... < q ... < q_N$, tj. dobili smo bazisni vektor tipa (11.1.11)). Desna strana od (11.1.19a), zbog (11.1.18), dovodi do: $DS \stackrel{\text{def}}{=} (\sum_{m=1}^{\infty} U_{qm} a_m^\dagger) a_{q_1}^\dagger ... a_{q_N}^\dagger \mid 0\,\rangle = (\sum_m U_{qm} a_m^\dagger) \sum_{m_1} \cdots \sum_{m_N} U_{q_1 m_{p_1}} ... U_{q_N m_{p_N}} a_{m_1}^\dagger ... a_{m_N}^\dagger \mid 0\,\rangle$.
Pronađimo u uređenom skupu $q_1 < ... < q_N$ gde spada q, tj. kako ćemo dobiti $q_1 < ... \leq q < ... < q_N$ (dobijamo $N+1$ članova, q može biti i prvi i poslednji i čak možemo imati $q \leq q$ jedno pored drugog ako $q_1 < ... < q_N$ sadrži q). Onda

$$DS = \sum_{m_1} ... \sum_{m} ... \sum_{m_N} U_{q_1 m_1} ... U_{qm} ... U_{q_N m_N} (-1)^{b(q)} a_{m_1}^\dagger ... a_m^\dagger ... a_{m_N}^\dagger \mid 0\,\rangle, \tag{11.1.21}$$

gde je $b(q)$ broj članova u $q_1 < ... < q_N$ koji dolaze ispred q (i baš toliko $a_{m_i}^\dagger$ smo "preskočili" sa $a_m^\dagger$).
Ako $q \notin \{q_1, ..., q_N\}$, onda se iz (11.1.18) vidi da i (11.1.20) daje (11.1.21), tj. $LS = DS$.
Neka je $q = q_i \in \{q_1, ..., q_N\}$. Onda (11.1.21) u stvari glasi

$$DS = \sum_{m_1} ... \sum_{m} \sum_{m_i} ... \sum_{m_N} U_{q_1 m_1} ... U_{qm} U_{qm_i} ... U_{q_N m_N} (-1)^{b(q)} a_{m_1}^\dagger ... a_m^\dagger a_{m_i}^\dagger ... a_{m_N}^\dagger \mid 0\,\rangle. \tag{11.1.22}$$

Sabirci u kojima je $m = m_i$ daju nulu, jer $a_m^\dagger a_m^\dagger = 0$. Za svaki sabirak u kojem $m < m_i$ postoji sabirak $m > m_i$ sa istim vrednostima kvantnog broja ostalih kreacionih operatora. Pošto $U_{qm} U_{qm_i} = U_{qm_i} U_{qm}$, a $a_m^\dagger a_{m_i}^\dagger = -a_{m_i}^\dagger a_m^\dagger$ ta dva sabirka se potiru. I tako se (11.1.22) svodi na nulu baš kao i (11.1.20). *Q. E. D.*

Čitalac je verovatno zapazio da smo redundantno razvijanje (11.1.18) u Lemi L 11.1.2 dokazali samo za bazisne vektore tipa (11.1.11) sa leve strane, ali sad, kad smo dokazali (11.1.19a), (11.1.18) važi za bilo koji proizvod kreacionih operatora na levoj strani (za dati bazis $\{|\, q\,\rangle | q = 1,2,...\}$), sa ponavljanjem i za bilo koju permutaciju fiksirane sukcesije.

11.1.6 Operatori polja

Mnogo puta smo imali prilike da vidimo da se uopšteni bazis koristi u punoj analogiji sa pravim bazisom, samo što se suma zamenjuje integralom. Tako se i transformacione formule (11.1.16) i (11.1.19) neposredno uopštavaju na slučaj kontinualnog (tj. uopštenog) bazisa. U ovom paragrafu proučićemo najvažniji primer svojstvenog bazisa operatora radijus vektora i projekcije spina u ulozi "novog" bazisa.

Uzmimo kao specijalan slučaj od (11.1.16) sledeće razvijanje:

$$|\, \mathbf{r}, m_s\,\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} U_{\mathbf{r}m_s,m} \mid m\,\rangle \tag{11.1.23}$$

(očigledno: $U_{\mathbf{r}m_s,m} = \langle\, m \mid \mathbf{r}, m_s \rangle$, tj. $\phi_m(\mathbf{r}, m_s) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, \mathbf{r}, m_s \mid m \rangle = U_{\mathbf{r}m_s,m}^*$ je koordinatno-spinski reprezentant vektora $|\, m\,\rangle$ "starog" bazisa).

Anihilacioni i kreacioni oparatori koje definiše bazis $\{| \mathbf{r} m_s \rangle \mid \forall r, m_s = -s, ..., s\}$ obeležavaju se sa $\psi(\mathbf{r}, m_s)$ odnosno sa $\psi^\dagger(\mathbf{r}, m_s)$ nazivaju *operatorima polja.* (Svakoj tački pridružuje se operator, slično kao što se na primer u klasičnom električnom polju svakoj tački pridružuje vektor $\mathbf{E}(\mathbf{r})$.) Operatori polja, naravno, ne zavise ni od kojeg drugog bazisa, već samo od pomenutog bazisa $\{| \mathbf{r}, m_s \rangle | \forall \mathbf{r}, m_s\}$, ali na osnovu (11.1.23) mogu se izraziti pomoću a_m i $a_m^\dagger$ preko formula (11.1.19a):

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}, m_s) = \sum_{m=1}^{\infty} \phi_m^*(\mathbf{r}, m_s) a_m^\dagger, \quad \psi(\mathbf{r}, m_s) = \sum_{m=1}^{\infty} \phi_m(\mathbf{r}, m_s) a_m \qquad (11.1.24a,b)$$

(iskoristili smo i formule ispod (11.1.23)).

Pošto razvijanje koje je inverzno od (11.1.23) glasi: $| \, m \rangle = \sum_{m_s} \int d\mathbf{r} U^\dagger_{\mathbf{r} m_s, m} \mid \mathbf{r}, m_s \rangle = \sum_{m_s} \int d\mathbf{r} \phi_m(\mathbf{r}, m_s) \mid \mathbf{r}, m_s \rangle$, inverzne transformacije od (11.1.24) glase

$$a_m^\dagger = \sum_{m_s} \int d\mathbf{r} \phi_m(\mathbf{r}, m_s) \psi^\dagger(\mathbf{r}, m_s), \quad a_m = \sum_{m_s} \int d\mathbf{r} \phi_m^*(\mathbf{r}, m_s) \psi(\mathbf{r}, m_s). \qquad (11.1.25a,b)$$

Zadatak 11.1.13 Dokazati da operatori polja zadovoljavaju sledeće antikomutacione relacije:

$$[\psi^\dagger(\mathbf{r}, m_s), \psi^\dagger(\mathbf{r}', m_s')]_+ = 0, \quad [\psi(\mathbf{r}, m_s), \psi(\mathbf{r}', m_s')]_+ = 0, \qquad (11.1.26a,b)$$

$$[\psi(\mathbf{r}, m_s), \psi^\dagger(\mathbf{r}', m_s')]_+ = \delta_{m_s, m_s'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \qquad (11.1.26c)$$

11.1.7 Operator kinetičke energije, spoljašnjeg polja i interakcije

U jednofermionskom prostoru stanja $\mathcal{H}_1^{(u)}$ operator kinetičke energije glasi $\hat{T}_1 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m}$, a u $\mathcal{H}_{1...N}^{(u)}$ glasi

$$\boxed{\hat{T}_{1...N} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^N \hat{T}_i}, \qquad (11.1.27a)$$

gde je

$$\hat{T}_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m}, \quad i = 1, ..., N. \qquad (11.1.27b)$$

Pošto je $\hat{T}_{1...N}$ simetričan operator, on se redukuje u fermionskom prostoru $\mathcal{V}_a^{(N)} \subset \mathcal{H}_{1...N}^{(u)}$.

Analogno, kako god da glasi operator spoljašnjeg polja u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ (na primer, $\hat{V}_1 = -\frac{Ze^2}{r_1}$ za elektron u vodoniku-sličnom atomu), istom funkcionalnom zavisnošću od osnovnog skupa opservabli dat je i operator $\hat{V}_i$ spoljašnjeg polja koje deluje na i-tu česticu (sve čestice su u "istom" polju, stoga su operatori $\hat{V}_i$ ekvivalentni po izomorfizmima $\mathcal{J}_{j \leftarrow i}$ iz § 9.3.4). U fermionskom prostoru $\mathcal{V}_a^{(N)} \subset \mathcal{H}_{1...N}^{(u)}$ deluje $\sum_{i=1}^N \hat{V}_i$.

Zadatak 11.1.14 Kako glasi operator kinetičke energije i operator spoljašnjeg polja koji deluju na vakuum $| \, 0 \rangle$? Dati fizičko obrazloženje za odgovor.

Operator spoljašnjeg polja $\sum_{i=1}^{N}\hat{V}_i$ je istog tipa kao operator kinetičke energije (11.1.27a). Oba pripadaju tzv. *aditivnim operatorima jednočestičnog tipa.* Za formalizam druge kvantizacije je od velikog značaja da se proizvoljan operator ovog tipa izrazi kao što prostija funkcija kreacionih i anihilacionih operatora $a_m^\dagger$ i a_m.

Teorem 11.1.2 *Neka je u jednofermionskom prostoru stanja $\mathcal{H}_1^{(u)}$ zadata opservabla $\hat{B}_1$ i neka je u zadatom bazisu $\{|\ m\ \rangle | m=1,2,...\}$ reprezentuje matrica $B=(B_{mm'}\overset{\mathrm{def}}{=}\langle m\ |\ \hat{B}_1\ |\ m'\ \rangle)$. Onda aditivni operator jednočestičnog tipa $\hat{B}=\sum_{i=1}^{N}\hat{B}_i$, koji deluje u $\mathcal{V}_a^{(N)}$ sabirku u (11.1.1a), u celom Fock-ovom prostoru $\mathcal{H}_{II}^f$ glasi*

$$\boxed{\hat{B}=\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{m'=1}^{\infty}B_{mm'}a_m^\dagger a_{m'}}, \tag{11.1.28}$$

Dokaz ćemo dati u Dodatku § 11.1.10.

Zadatak 11.1.15 Nabrojati nekoliko opservabli iz $\mathcal{H}_1^{(u)}$ koje po svom fizičkom smislu definišu aditivne operatore jednočestičnog tipa u $\mathcal{H}_{II}^f$, kao i one za koje to nije slučaj.

Zadatak 11.1.16 Pokazati da su operator kinetičke energije i vektorska opservabla impulsa u impulsno-spinskoj reprezentaciji u $\mathcal{H}_{II}^f$

$$\hat{T}=\sum_{m_s}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\mathbf{p}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi^\dagger(\mathbf{p},m_s)\psi(\mathbf{p},m_s), \tag{11.1.29}$$

odnosno

$$\hat{\mathbf{P}}=\sum_{m_s}\int\mathrm{d}\mathbf{p}\mathbf{p}\psi^\dagger(\mathbf{p},m_s)\psi(\mathbf{p},m_s), \tag{11.1.30}$$

gde su $\psi^\dagger(\mathbf{p},m_s)$, $\psi(\mathbf{p},m_s)$ impulsno-spinski operatori polja, tj. kreacioni i anihilacioni operatori koji odgovaraju bazisu $\{|\ \mathbf{p},m_s\,\rangle|\forall\mathbf{p},m_s\}\subset\mathcal{H}_1^{(u)}$.

Zadatak 11.1.17 Pokazati da operator Coulombovog polja koje deluje na elektronski omotač u koordinatno-spinskoj reprezentaciji u $\mathcal{H}_{II}^f$ glasi

$$\hat{V}=\sum_{m_s}\int\mathrm{d}\mathbf{r}\frac{-Ze^2}{r}\psi^\dagger(\mathbf{r},m_s)\psi(\mathbf{r},m_s). \tag{11.1.31}$$

Neka je *interakcija* dva identična fermiona zadata operatorom $\hat{V}_{12}$ u $\mathcal{H}_{12}^{(u)}$. Onda je interakcija i-tog i j-tog fermiona u $\mathcal{H}_{ij}^{(u)}$ izražena operatorom $\hat{V}_{ij}$ koji je *ista* funkcija odgovarajućeg osnovnog skupa opservabli u $\mathcal{H}_{ij}^{(u)}$ kao $\hat{V}_{12}$ u $\mathcal{H}_{12}^{(u)}$. Operator interakcije sistema od N identičnih fermiona onda glasi

$$\boxed{\sum_{i<j}^{N}\hat{V}_{ij}}. \tag{11.1.32}$$

Operator interakcije (11.1.32) je primer tzv. *aditivnog operatora dvočestičnog tipa.* Sad ćemo i ovaj operator izraziti na jeziku druge kvantizacije.

Teorem 11.1.3 *Neka je $\hat{V}_{12}$ simetričan operator u $\mathcal{H}_{12}^{(u)}$ i neka ga u bazisu $\{|\ m\,\rangle\ |\ m'\,\rangle|m,m'=1,2,...\}\subset\mathcal{H}_{12}^{(u)}$ reprezentuje matrica $V_{12}=(V_{m_1m_2,m_1'm_2'}\overset{\mathrm{def}}{=}\langle m_1,m_2\ |\ \hat{V}_{12}\ |\ m_1',m_2'\,\rangle)$, gde je, na primer, $|\ m_1',m_2'\,\rangle\overset{\mathrm{def}}{=}|\ m_1'\,\rangle\otimes|\ m_2'\,\rangle$, itd. Neka, osim toga, $\hat{V}_{12}$ definiše u pojedinim fermionskim*

prostorima $\mathcal{V}_a^{(N)}$ operator tipa (11.1.32), $N = 2, 3, ...$, a u $\mathcal{V}_a^{(N=1)}$ i u $\mathcal{V}_a^{(N=0)}$ neka deluje kao nula. Onda u Fock-ovom prostoru $\mathcal{H}_{II}^f$ dotični aditivni operator dvočestičnog tipa glasi

$$\boxed{\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{m_1=1}^{\infty}\sum_{m_2=1}^{\infty}\sum_{m_1'=1}^{\infty}\sum_{m_2'=1}^{\infty} V_{m_1 m_2, m_1' m_2'} a_{m_1}^\dagger a_{m_2}^\dagger a_{m_2'} a_{m_1'}}. \qquad (11.1.33)$$

Dokaz videti u Dodatku § 11.1.11.

Obratiti pažnju da je redosled anihilacionih operatora $a_{m_2'}a_{m_1'}$, a redosled istih vrednosti kvantnog broja u matričnom elementu je $V_{...,m_1'm_2'}$.

Značaj formula (11.1.28) i (11.1.33) je u tome što predstavljaju pogodnu formu dotičnih operatora za izračunavanje matričnih elemenata u bazisu (11.1.11).

11.1.8 * Prostorna inverzija i Galilej-evie transformacije u Fock-ovom prostoru

Kao što smo videli u odeljku § 8.1, operator prostorne inverzije $\hat{\mathcal{J}}_p$ je multiplikativni operator, tj. u $\mathcal{H}_{1...N}^{(u)}$ deluje kao $\hat{\mathcal{J}}_1^{(p)} \otimes \hat{\mathcal{J}}_2^{(p)} \otimes ... \otimes \hat{\mathcal{J}}_N^{(p)}$. Pitamo se kako deluje u $\mathcal{H}_{II}^f$. Zapravo, dovoljno je da znamo u šta preslikava vakuum i kako deluje na kreacione i na anihilacione operatore.

Pošto je $\hat{\mathcal{J}}_1^{(p)}$ unitarni operator, proizvoljni bazis $\{\mid m\rangle | m = 1, 2, ...\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ prevodi u nov bazis $\{\mid q\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathcal{J}}_1^{(p)} \mid m\rangle \mid q = m = 1, 2, ...\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ i možemo iskoristiti formule (11.1.16) i (11.1.19*a*-11.1.19*b*). Drugim rečima, ako znamo kako se $\hat{\mathcal{J}}_1^{(p)}$ reprezentuje u bazisu $\{\mid m\rangle | m = 1, 2, ...\}$ (matrica reprezentant je inverzna od matrice razvijanja), (11.1.19) nam odmah daje delovanje na operatore druge kvantizacije.

Deo fizičke ideje vakuuma $\mid 0\rangle$ je u tome da operator parnosti ne izaziva promene u njemu tj. da $\hat{\mathcal{J}}_p \mid 0\rangle = \mid 0\rangle$.

Zadatak 11.1.18 Pokazati da, obeležavajući sa $\hat{\mathcal{J}}_p$ operator parnosti (tj. prostorne inverzije) i u $\mathcal{H}_{II}^f$, imamo

$$\hat{\mathcal{J}}_p \psi^\dagger(\mathbf{r}, m_s)\hat{\mathcal{J}}_p = \psi^\dagger(-\mathbf{r}, m_s), \quad \hat{\mathcal{J}}_p \psi(\mathbf{r}, m_s)\hat{\mathcal{J}}_p = \psi(-\mathbf{r}, m_s) \qquad (11.1.34a,b)$$

$$\hat{\mathcal{J}}_p \psi^\dagger(\mathbf{p}, m_s)\hat{\mathcal{J}}_p = \psi^\dagger(-\mathbf{p}, m_s), \quad \hat{\mathcal{J}}_p \psi(\mathbf{p}, m_s)\hat{\mathcal{J}}_p = \psi(-\mathbf{p}, m_s) \qquad (11.1.35a,b)$$

pod pretpostavkom da je unutrašnja parnost fermiona pozitivna.

Zadatak 11.1.19 Neka se jednofermionski kvantni broj m sastoji od četiri kvantna broja: n, l, m_l, m_s, gde je n kvantni broj u radijalnom faktor prostoru $L_2^{(r)}$ itd. (Za primere videti vodonikov atom § 9.1.7 i harmonijski oscilator § 9.2.5). Pokazati da operator prostorne inverzije deluje na odgovarajuće operatore druge kvantizacije u $\mathcal{H}_{II}^f$ na sledeći način:

$$\hat{\mathcal{J}}_p a_{nlm_lm_s}^\dagger \hat{\mathcal{J}}_p = (-1)^l a_{nlm_lm_s}^\dagger, \quad \hat{\mathcal{J}}_p a_{nlm_lm_s} \hat{\mathcal{J}}_p = (-1)^l a_{nlm_lm_s}. \qquad (11.1.36a,b)$$

Zadatak 11.1.20 Pomoću § 9.2.6 dokazati

$$\hat{\mathcal{J}}_p a_{n_xn_yn_z}^\dagger \hat{\mathcal{J}}_p = (-1)^{n_x+n_y+n_z} a_{n_xn_yn_z}^\dagger, \quad \hat{\mathcal{J}}_p a_{n_xn_yn_z} \hat{\mathcal{J}}_p = (-1)^{n_x+n_y+n_z} a_{n_xn_yn_z}. \qquad (11.1.37a,b)$$

Što se tiče Galilej-evih transformacija (rotacija, translacija i specijalnih Galilej-evih transformacija), one su takođe multiplikativni operatori i prenose u $\mathcal{H}_{II}^f$ analogno kao $\hat{\mathcal{J}}_p$.

Zadatak 11.1.21 Izvesti delovanje proizvoljne rotacije i proizvoljne translacije na operatore druge kvantizacije koji se pojavljuju u Zadacima Z 11.1.18-Z 11.1.20.

11.1.9 * Operator vremenske inverzije u Fock-ovom prostoru

Na kraju, postavimo i pitanje kako operator inverzije vremena $\hat{\mathcal{J}}_v$ deluje na operatore druge kvantizacije u $\mathcal{H}_{II}^f$.

Neka je $\hat{U}_a^{(1)}$ proizvljan antiunitarni operator u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ (na primer $\hat{\mathcal{J}}_1^{(v)}$,) pomnožen operatorom neke Galilej-eve transformacije). Pri delovanju na proizvoljan bazis $\{| \, m \rangle | m = 1, 2, ...\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ pogodno je da operator $\hat{U}_a$ faktorišemo

$$\hat{U}_a = \hat{U}\hat{U}_a^{(m)}, \tag{11.1.38a}$$

gde je $\hat{U}_a^{(m)}$ po definiciji antilinearni operator za koji je svaki bazisni vektor $| \, m \rangle$ invarijantan:

$$\hat{U}_a^{(m)} \mid m \rangle = \mid m \rangle, \quad m = 1, 2, ... \tag{11.1.38b}$$

(gornje m je simbolično, ne uzima vrednosti). $\hat{U}_a^{(m)}$ je, naravno, antiunitarna involucija. (Operator $\hat{U}_a$ se u pomenutom bazisu reprezentuje antilinearnom matricom UK, gde matrica U reprezentuje gornji unitarni operator $\hat{U}$, a K reprezentuje $\hat{U}_a^{(m)}$. Uporediti iznad (Z 2.7.5)).

Pošto se operator $\hat{U}_a$ isključivo pojavljuje u ulozi operatora simetrije, on je multiplikativan operator. Drugim rečima u $\mathcal{H}_{1...N}^{(u)}$ deluje $\hat{U}_{a,1} \otimes \hat{U}_{a,2} \otimes ... \otimes \hat{U}_{a,N}$, gde su $\hat{U}_{a,i}, i = 2, 3, ...N$ ekvivalentni operatoru $\hat{U}_{a,1} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}_a$ a deluju u $\mathcal{H}_i^{(u)}$. Ovaj N-čestični operator ja simetričan i stoga se redukuje u $\mathcal{V}_a^{(N)} \subset \mathcal{H}_{1...N}^{(u)}$.

Multiplikativnost je analogna kao za linearne operatore. Novo je to što u $\mathcal{H}_{1...N}^{(u)}$ i $\mathcal{V}_a^{(N)}$ prenosimo i faktorizaciju $\hat{U}_a = \hat{U}\hat{U}_a^{(m)}$. Obeležavajući i N-čestični operator sa $\hat{U}_a$, imamo:

$$\hat{U}_a = (\hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2 \otimes ... \otimes \hat{U}_N)(\hat{U}_{a,1}^{(m)} \otimes \hat{U}_{a,2}^{(m)} \otimes ... \otimes \hat{U}_{a,N}^{(m)}), \tag{11.1.39}$$

gde su faktori $i = 2, 3, ..., N$ ekvivalentni odgovarajućem prvom faktoru.

Koji god da je operator simetrije $\hat{U}_a$, *po definiciji vakuuma* $\hat{U}_a \mid 0 \rangle = \mid 0 \rangle$. U stvari, svaka Galilej-eva transformacija (i $\hat{\mathcal{J}}_p$, kao što smo videli) deluje na $\mid 0 \rangle$ kao identični operator, a vakuum se bira tako u $\mathcal{V}_a^{(N=0)}$ da važi $\hat{\mathcal{J}}_v \mid 0 \rangle = \mid 0 \rangle$.

Kad se sve to prenese u $\mathcal{H}_{II}^f$ (imajući u vidu (11.1.1)), obeležavajući i dalje nepromenjeno i $\hat{U}_a$ i njegov linearni i antilinearni faktor (u smislu (11.1.38a) i (11.1.39)), imamo opet

$$\hat{U}_a = \hat{U}\hat{U}_a^{(m)}. \tag{11.1.40}$$

$\hat{U}_a^{(m)}$ je antiunitarna involucija koja ostavlja svaki vektor bazisa brojeva popunjenosti (11.1.4) ili (11.1.11) invarijantnim. A unitarni operator $\hat{U}$ se dobija iz odgovarajućeg linearnog faktora od $\hat{U}_a$ u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ u punoj analogiji sa $\hat{\mathcal{J}}_p$ ili sa operatorima Galilej-evih transformacija.

Sve što smo rekli svodi se praktično na sledeće: u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ faktorišemo $\hat{U}_a$ prema (11.1.38a), tj. na osnovu definicije (11.1.38b), i izračunavamo linearni faktor $\hat{U}$. A njega onda prenesemo analogno kao $\hat{\mathcal{J}}_p$ u $\mathcal{H}_{II}^f$. Pri delovanju na operatore druge kvantizacije i na vektore bazisa (11.1.11) koristimo se samo linearnim operatorom $\hat{U}$. Kada delujemo na proizvoljni vektor u $\mathcal{H}_{II}^f$, razvijemo ga u red po vektorima bazisa (11.1.11) i onda se koristimo i faktorom $\hat{U}_a^{(m)}$ iz (11.1.40). Njegovo delovanje se svodi samo na kompleksno konjugovanje svih koeficijenata razvijanja.

Zadatak 11.1.22 Pokazati da analogon od (11.1.34a), na primer za $s = \frac{1}{2}$, glasi

$$\hat{\mathcal{J}}_v \psi^\dagger(\mathbf{r}, m_s) \hat{\mathcal{J}}_v^{-1} = (-1)^{\frac{1}{2}+m_s} \psi^\dagger(\mathbf{r}, -m_s) \tag{11.1.41}$$

(iskoristiti (8.2.25c). Izvesti i analogone ostalih jednakosti u Zadacima Z 11.1.18-Z 11.1.20.

11.1.10 * Dodatak — dokaz teorema 2

A) DRUGA KVANTIZACIJA

Da bismo dokazali Teorem T 11.1.2, izračunajmo prvo proizvoljni matrični element desne strane od (11.1.28) u reprezentaciji brojeva popunjenosti (11.1.4):

$$DS \stackrel{\text{def}}{=} \langle \nu_1, \nu_2, ... \mid \sum_{mm'} B_{mm'} a_m^\dagger a_{m'}^\dagger \mid \nu_1', \nu_2', ... \rangle = \sum_{mm'} B_{mm'} (\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid a_m^\dagger)(a_{m'} \mid \nu_1', \nu_2', ... \rangle).$$

Moramo imati u vidu da bra-u $\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid$ odgovara ket $\mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle$ i u stvari s njime ćemo računati.

Iz (11.1.5a) je očigledno da je DS=0 ako $N \neq N'$, jer u zagradama ako nije nula onda je vektor od $(N-1)$ odnosno od $(N'-1)$ čestica. Uzećemo posebno dijagonalne i posebno vandijagonalne matrične elemente:

$$1) \quad \langle \nu_1, \nu_2, ... \mid \sum_{mm'} B_{mm'} a_m^\dagger a_{m'}^\dagger \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle = \sum_{m, \nu_m > 0} B_{mm}. \tag{11.1.42a}$$

Jednakost (11.1.42a) sadrži i slučaj kad su bra i ket jednaki vakuumu. Onda nema $\nu_m > 0$ (popunjenih stanja), te nema ni jednog sabirka, tj. imamo nulu.

2) Da bismo dobili nenulti vandijagonalni matrični element, potrebno je da $N = N'$ i da se $\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid$ i $\mid \nu_1', \nu_2', ... \rangle$ razlikuju samo u jednom (jednofermionskom) stanju. Obeležimo sa $\mid m \rangle$ stanje koje je popunjeno u bra-u, a nije u ket-u, a sa $\mid m \rangle$ stanje koje je popunjeno u ket-u, a nije u bra-u. Onda

$$DS = B_{\overline{m}\overline{m}'} (-1)^{b(\overline{m})} (-1)^{b(\overline{m}')}, \tag{11.1.42b}$$

a $(-1)^{b(\overline{m})}(-1)^{b(\overline{m}')} = (-1)^{b(\overline{m})-b(\overline{m}')}$ (pišemo ovako ako $\mid \overline{m} \rangle < \mid \overline{m}' \rangle$), pri čemu je $b(\overline{m}') - b(\overline{m})$ broj zajedničkih popunjenih stanja u bra-u i ket-u koji leže između $\mid \overline{m} \rangle$ i $\mid \overline{m}' \rangle$ (u fiksiranoj sukcesiji jednofermionskih stanja).

Pređimo sad na prvu kvantizaciju.

B) PRVA KVANTIZACIJA

Treba da izračunamo $LS \stackrel{\text{def}}{=} \langle m_1 < ... < m_2 \mid \sum_{i=1}^N \hat{B}_i \mid m_1' < ... < m_N' \rangle$. Očigledno $LS \neq 0$ samo ako $N = N'$. Iz (9.4.7) za $N = N' \geq 1$ sledi

$$LS = N! \langle m_1 \mid \langle m_2 \mid ... \langle m_N \mid \hat{A} \sum_{i=1}^N \hat{B}_i \hat{A} \mid m_1' \rangle \mid m_2' \rangle ... \mid m_N' \rangle,$$

gde je $\hat{A} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N!} \sum_{p \in S_N} (-1)^p \hat{P}$ antisimetrizator, tj. projektor na antisimetrični potprostor $\mathcal{V}_a^{(N)} \subset \mathcal{H}_{1...N}^{(u)}$.

Zbog simetričnosti operatora $\sum_{i=1}^N \hat{B}_i$, imamo $\hat{A}(\sum_i \hat{B}_i) = (\sum_i \hat{B}_i)\hat{A}$, a usled idempotentnosti projektora, $\hat{A}^2 = \hat{A}$. Tako dolazimo do formule

$$LS = \langle m_1 \mid \langle m_2 \mid ...\langle m_N \mid (\sum_{i=1}^N \hat{B}_i) \sum_{p\in S_N} (-1)^p \hat{P} \mid m_1' \rangle \mid m_2' \rangle ... \mid m_N' \rangle = \tag{11.1.43}$$

$$= \sum_{p\in S_N} (-1)^p \sum_{i=1}^N \langle\, m_1 \mid m'_{p_1}\rangle ... \langle m_i \mid \hat{B}_i \mid m'_{p_i}\rangle ... \langle\, m_N \mid m'_{p_N}\rangle.$$

Tu smo iskoristili i formulu (homomorfnog) prenošenja permutacije p u operator $\hat{P}$ u $\mathcal{H}^{(u)}_{1...N}$: $\hat{P} \mid m_1 \rangle \mid m_2 \rangle ... \mid m_N \rangle = \mid m_{p_1^{-1}} \rangle \mid m_{p_2^{-1}} \rangle ... \mid m_{p_N^{-1}} \rangle$ (uporediti (9.3.17)), ali prešli smo na sumu po p^{-1} (koji prelazi isti skup S_N), mada (radi jednostavnosti) pišemo i dalje "$\sum_{p\in S_N}$" umesto "$\sum_{p^{-1}\in S_N}$" a koristimo se i jednakošću $(-1)^{p^{-1}} = (-1)^p$, $\forall p$.

1) U slučaju $m_1 = m_1', m_2 = m_2', ..., m_N = m_N'$ za sve netrivijalne p,bar jedan jednočestični skalarni proizvod je jednak nuli. Stoga iz "$\sum_{p\in S_N}$" doprinosi samo identična transformacija i sledi

$$LS = \langle m_1 \mid \hat{B}_1 \mid m_1 \rangle + \langle m_2 \mid \hat{B}_2 \mid m_2 \rangle + ... + \langle m_N \mid \hat{B}_N \mid m_N \rangle = \sum_{m,\nu_m>0} B_{mn}. \tag{11.1.44a}$$

Kao što smo se uverili u Zadatku Z 11.1.14, aditivni operator jednočestičnog tipa deluje na vakuum kao nula, te i tu imamo slaganje sa odgovarajućim rezultatom iz A.

2) Iz prisustva faktora u svakom sabirku na desnoj strani od (11.1.43) proizlazi da je $LS \neq 0$ samo ako se stanja $\mid m_1 \rangle ... \mid m_N \rangle$ i stanja $\mid m_1' \rangle ... \mid m_N' \rangle$ razlikuju najviše za po jedno stanje. Obeležimo višak među ne-prim stanjima sa $\mid \overline{m} \rangle$, a višak među prim stanjima sa $\mid \overline{m}' \rangle$. Iz zbira "$\sum_{i=1}^N$" doprinosi samo sabirak u kojem $\hat{B}_i$ deluje nalevo upravo na $\langle \overline{m} \mid$ (inače faktor $\langle\, \overline{m} \mid ...\rangle$ daje nulu). Izmenivši redosled zbirova u (11.1.43) i izdvojivši ovaj sabirak, iz zbira "$\sum_{p\in S_N}$" nenulti doprinos daje samo permutacija $\overline{p}$ koja postiže: $\langle\, m_1 \mid m_1\rangle\langle\, m_2 \mid m_2\rangle ... \langle \overline{m} \mid \hat{B}_i \mid \overline{m}' \rangle ... \langle\, m_N \mid m_N\rangle$ (a to je očigledna tačno jedna permutacija). Stoga rezultat glasi

$$LS = (-1)^{\overline{p}} B_{\overline{m}\overline{m}'}. \tag{11.1.44b}$$

Pod pretpostavkom da $\overline{m} < \overline{m}'$, lako se vidi da je $(-1)^{\overline{p}} = (-1)^b$, gde je b broj zajedničkih stanja $\mid m_i \rangle$ u bra-u i u ket-u koja leže između $\mid \overline{m} \rangle$ i $\mid \overline{m}' \rangle$ (i istovremeno minimalan broj transpozicija na levo potreban da $\mid \overline{m}' \rangle$ "preskoči" pomenuta stanja i dođe na isto mesto gde je $\langle \overline{m} \mid$). U slučaju $\mid \overline{m} \rangle > \mid \overline{m}' \rangle$, dolazimo do istog zaključka. Dakle, (11.1.44b) i (11.1.42b) se podudaraju.

11.1.11 * Dodatak — dokaz teorema 3

A) DRUGA KVANTIZACIJA

Radi dokaza Teorema T 11.1.3, izračunaćemo matrični element desne strane od (11.1.33) u reprezentaciji brojeva popunjenosti (11.1.4):

$$DS \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \langle \nu_1, \nu_2, ... \mid \sum_{m_1 m_2 m_1' m_2'} V_{m_1 m_2 m_1' m_2'} a^\dagger_{m_1} a^\dagger_{m_2} a_{m_2'} a_{m_1'} \mid \nu_1', \nu_2', ... \rangle = \tag{11.1.45}$$

$$\sum_{m_1 m_2 m_1' m_2'} V_{m_1 m_2 m_1' m_2'} (\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid a^\dagger_{m_1} a^\dagger_{m_2})(a_{m_2'} a_{m_1'} \mid \nu_1', \nu_2', ... \rangle).$$

Bra $\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid a^\dagger_{m_1} a^\dagger_{m_2}$ odgovara ket-u $a_{m_2} a_{m_1} \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle$. Izračunajmo ket i bra u malim zagradama u (11.1.45):

$$a_{m_2'} a_{m_1'} \mid \nu_1', \nu_2', ... \rangle = \begin{cases} 0, & \text{za } m_2' = m_1', \\ (-1)^{b(m_1', m_2')} \nu'_{m_1'} \nu'_{m_2'} \mid \nu_1', ... \nu'_{m_1'} - 1, ... \nu'_{m_2'} - 1, ... \rangle, & \text{za } m_2' \neq m_1', \end{cases} \quad (11.1.46a, b)$$

gde smo sa $b(m_1', m_2')$ obeležili broj popunjenih stanja u $\mid \nu_1', \nu_2', ... \rangle$ koja su različita od $\mid m_1' \rangle$ i $\mid m_2' \rangle$, a koja leže između njih (bez obzira da li je $m_1' < m_2'$ ili $m_2' > m_1'$), s tim da ovaj broj uvećamo za jedan ako $m_2' < m_1'$. Naime, u $b(m_1', m_2')$ pišemo prvo indeks prvo-delujućeg anihilacionog operatora (uporediti (11.1.46a)), a ako on u fiksiranoj sukcesiji indeksa dolazi posle m_2', onda jednim -1 moramo "platiti" komutiranje anihilacionih operatora $a_{m_2'}$ i $a_{m_1'}$ da bismo prvo delovali sa $a_{m_2'}$.

Treba zapaziti da je simbol $b(m_1', m_2')$ nekompletan, jer je vektor $\mid \nu_1', \nu_2', ... \rangle$ izostavljen u njemu.

Ako se radi o jednom te istom vektoru bazisa brojeva popunjenosti, lako se vidi da je

$$(-1)^{b(m_1', m_2')} = -(-1)^{b(m_1', m_2')}. \quad (11.1.47)$$

Analogno, za bra u maloj zagradi u (11.1.45) se dobija

$$\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid a^\dagger_{m_1} a^\dagger_{m_2} = \begin{cases} 0, & \text{za } m_1 = m_2, \\ \langle \nu_1, ... \nu_{m_1} - 1, ... \nu_{m_2} - 1, ... \mid \nu_{m_1} \nu_{m_2} (-1)^{b(m_1, m_2)}, & \text{za } m_1 \neq m_2 \end{cases}. \quad (11.1.46c, d)$$

Izraze u zagradama u (11.1.45) pominjaćemo kao bra odnosno ket. Ako je N broj fermiona u $\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid$, a N' broj fermiona u $\mid \nu_1', \nu_2', ... \rangle$, onda u bra-u, ako nije nula, imamo $N - 2$ fermiona, a u ket-u, opet ako nije nula, imamo $(N' - 2)$ fermiona. Prema tome, $DS \neq 0$ u (11.1.45) samo ako $N = N' \leq 2$.

a) Uzmimo prvo *dijagonalne* matrične elemente, tj. pretpostavimo da $\nu_m = \nu_{m'}$, $m = 1, 2, ...$ Očigledno je da doprinose samo oni sabirci u (11.1.45) u kojima $m_1 \neq m_2$ i $\nu_{m_1} = \nu_{m_2} = 1$ ili $m_1 = m_1'$, $m_2 = m_2'$ ili $m_1 = m_2'$, $m_2 = m_1'$. To daje

$$DS = \frac{1}{2} \sum_{m_1 \neq m_2} (V_{m_1 m_2, m_1 m_2} (-1)^{b(m_1, m_2)} (-1)^{b(m_1, m_2)} + V_{m_1 m_2, m_2 m_1} (-1)^{b(m_1, m_2)} (-1)^{b(m_2, m_1)}) =$$

$$(11.1.48a)$$

$$\sum_{m_1 < m_2, \nu_{m_1} = \nu_{m_2} = 1} (V_{m_1 m_2, m_1 m_2} - V_{m_1 m_2, m_2 m_1})$$

(uporediti (11.1.47)). Iskoristili smo simetričnost operatora $\hat{V}_{12}$, koja povlači $V_{m_1 m_2, m_1' m_2'} \stackrel{\text{def}}{=} \langle m_1, m_2 \mid \hat{V}_{12} \mid m_1', m_2' \rangle = V_{m_1 m_2, m_2' m_1'} = \langle m_2, m_1 \mid \hat{V}_{12} \mid m_2', m_1' \rangle$

(jer $\hat{E}^2 = \hat{I}$, $\hat{E}^2 \hat{V}_{12} = \hat{E} \hat{V}_{12} \hat{E}$, gde je $\hat{E}$ operator izmene, uporediti § 9.3.2. Tako smo sveli sumu "$\sum_{m_1 \neq m_2}$" na "$2 \sum_{m_1 < m_2}$."

b) Za sledeći slučaj uzmimo *vandijagonalne* matrične elemente u kojima je razlika *u po jednom stanju*, tj. postoje $\overline{m}$ i $\overline{m}'$ takvi da $\nu_{\overline{m}} = 0$, $\nu'_{\overline{m}} = 0$, $\nu_{\overline{m}'} = 0$, $\nu'_{\overline{m}'} = 1$; inače $\nu_m = \nu'_m$. Imamo doprinos u (11.1.45) od 4 mogućnosti: $m_1 = \overline{m}$, $m_2 = m_2' = m \neq \overline{m}, \overline{m}'$, $\nu_m = 1$, $m_1' = \overline{m}'$;

$m_1=\overline{m}$, $m_2=m_1'=m\neq\overline{m},\overline{m}'$, $\nu_m=1$, $m_2'=\overline{m}'$, $m_1=m=m_1'\neq\overline{m},\overline{m}'$, $\nu_m=1$, $m_2=\overline{m}$; $m_2'=\overline{m}'$; $m_1=m=m_2'\neq\overline{m},\overline{m}'$, $\nu_m=1$, $m_2=\overline{m}$, $m_1'=\overline{m}'$. Stoga se (11.1.45) svodi na

$$DS=\frac{1}{2}\sum_{m\neq\overline{m},\overline{m}'}[V_{\overline{m}m,\overline{m}'m}(-1)^{b(\overline{m},m)}(-1)^{b'(\overline{m}',m)}+V_{\overline{m}m,m\overline{m}}(-1)^{b(\overline{m},m)}(-1)^{b'(m,\overline{m}')}+$$

$$V_{m\overline{m},m\overline{m}'}(-1)^{b(m,\overline{m})}(-1)^{b'(m,\overline{m}')}+V_{m\overline{m},\overline{m}'m}(-1)^{b(m,\overline{m})}(-1)^{b'(\overline{m}',m)}]=$$

$$\frac{1}{2}\sum_{m\neq\overline{m},\overline{m}';\nu_m=1}[(-1)^{b(\overline{m},m)+b'(\overline{m}',m)}(V_{\overline{m}m,\overline{m}'m}-V_{\overline{m}m,m\overline{m}'})+(-1)^{b(m,\overline{m})+b'(m,\overline{m}')}(V_{m\overline{m},m\overline{m}'}-V_{m\overline{m},\overline{m}'m})].$$

Na osnovu simetričnosti matričnih elemenata ($V_{m\overline{m},m\overline{m}'}=V_{\overline{m}m,\overline{m}'m}$ itd.) i (11.1.47) druga polovina poslednjeg izraza jednaka je prvoj, te se faktor 2 potire sa $\frac{1}{2}$:

$$DS=\sum_{m\neq\overline{m},\overline{m}';\nu_m=1}(-1)^{b(\overline{m},m)+b(\overline{m}',m)}(V_{\overline{m}m,\overline{m}'m}-V_{\overline{m}m,m\overline{m}'}).\qquad(11.1.48b)$$

c) Najzad, izračunajmo *vandijagonalne* matrične elemente u kojima je razlika *u po dva stanja*, tj. postoje $\overline{m}_1<\overline{m}_2$, $\overline{m}_1'<\overline{m}_2'$ takvi da $\nu_{\overline{m}_1}=1\neq\nu'_{\overline{m}_1}$, $\nu_{\overline{m}_2}=1\neq\nu'_{\overline{m}_2}$, $\nu_{\overline{m}_1'}=0\neq\nu'_{\overline{m}_1'}$, $\nu_{\overline{m}_2'}=0\neq\nu'_{\overline{m}_2'}$; inače $\nu_m=\nu_m'$. Opet imamo doprinos od četiri mogućnosti:

$$DS=\frac{1}{2}[V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_1'\overline{m}_2'}(-1)^{b(\overline{m}_1,\overline{m}_2)}(-1)^{b'(\overline{m}_1',\overline{m}_2')}+V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_2'\overline{m}_1'}(-1)^{b(\overline{m}_1,\overline{m}_2)}(-1)^{b'(\overline{m}_2',\overline{m}_1')}+$$

$$V_{\overline{m}_2\overline{m}_1,\overline{m}_1'\overline{m}_2'}(-1)^{b(\overline{m}_2,\overline{m}_1)}(-1)^{b'(\overline{m}_1,\overline{m}_2')}+V_{\overline{m}_2\overline{m}_1,\overline{m}_2'\overline{m}_1'}(-1)^{b(\overline{m}_2,\overline{m}_1)}(-1)^{b'(\overline{m}_2',\overline{m}_1')}].$$

Koristeći (11.1.47) i simetričnost $\hat{V}_{12}$, dolazimo do konačnog vida:

$$DS=(-1)^{b(\overline{m}_1,\overline{m}_2)+b'(\overline{m}_1',\overline{m}_2')}(V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_1'\overline{m}_2'}-V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_2'\overline{m}_1'}).\qquad(11.1.48c)$$

Pređimo sad na prvu kvantizaciju.

B) PRVA KVANTIZACIJA

Za $N,N'<2$ Teorem T 11.1.3 je očigledno tačan. Za $N=N'\geq 2$:

$$LS\stackrel{\text{def}}{=}\langle m_1<...<m_N\mid\sum_{i<j}^{N}\hat{V}_{ij}\mid m_1'<...m_N'\rangle=N!\langle m_1\mid\langle m_2\mid...\langle m_N\mid\hat{A}(\sum_{i<j}\hat{V}_{ij})\hat{A}\mid m_1'\rangle\mid m_2'\rangle...\mid m_N'\rangle$$

(koristimo (9.4.7).

Istim rezonovanjem kao u prethodnom paragrafu, dalje sledi:

$$LS=N!\langle m_1\mid\langle m_2\mid...\langle m_N\mid(\sum_{i<j}\hat{V}_{ij})\hat{A}\mid m_1'\rangle\mid m_2'\rangle...\mid m_N'\rangle.$$

Videli smo u (10.1.53 da $\hat{V}_{ij}=\hat{P}(i<j)\hat{V}_{12}\hat{P}(i<j)^{-1}$ (samo što je tamo permutacija $\hat{P}(i<j)$ obeležena sa $\hat{P}$), a pošto je $\hat{P}(i<j)^{-1}\hat{A}=(-1)^{p(i<j)}\hat{A}$ (uporediti dokaz L 9.4.1), sledi

$$LS=\sum_{i<j}\sum_{p\in S_N}(-1)^{p(i<j)}(-1)^p\langle m_{p(i<j)_1}\mid\langle m_{p(i<j)_2}\mid...\langle m_{p(i<j)_N}\mid\hat{V}_{12}\mid m'_{p(i<j)_1}\rangle\mid m'_{p(i<j)_2}\rangle...\mid m'_{p(i<j)_N}\rangle=$$

(11.1.49)

$$\sum_{i<j}(-1)^{p(i<j)}\sum_{p\in S_N}(-1)^p\langle m_i,m_j\mid\hat{V}_{12}\mid m'_{p_1},m'_{p_2}\rangle\langle m_{p(i<j)_3}\mid\hat{V}_{12}\mid m'_{p_3}\rangle...\langle m_{p(i<j)_N}\mid\hat{V}_{12}\mid m'_{p_N}\rangle,$$

jer $p(i<j)_1=i$, $p(i<j)_2=j$ (uporediti (10.1.53b).

Da bismo dobili $DS\neq 0$ u (11.1.49), svih $(N-2)$ jednofermionskih skalarnih proizvoda moraju biti 1 (a ne nula), a to znači da $\mid m_1<...<m_N\rangle$ i $\mid m'_1<...<m'_N\rangle$ moraju imati bar $(N-2)$ zajedničkih popunjenih jednofermionskih stanja. Dakle, do sada smo u skladu sa A. Analizirajmo sad slučaj po slučaj.

a) Za *dijagonalne* matrične elemente, tj. za slučaj $m_1=m'_1$, $m_2=m'_2,...,m_N=m'_N$, u zbiru "$\sum_{p\in S_N}$" u (11.1.49) doprinose samo $p=p(i<j)$ i $p=p'p(i<j)$, gde je p transpozicija koja će uzajamno zameniti stanja $\mid m'_{p(i<j)_1}\rangle$ i $\mid m_{p'(i<j)_2}\rangle$ (a ostala stanja neće menjati). Stoga

$$LS=\sum_{i<j}(V_{m_im_j,m_i,m_j}-V_{m_im_j,m_jm_i}).\qquad(11.1.50a)$$

Pošto $i<j\Leftrightarrow m_i<m_j$ (uporediti T 9.4.2), (11.1.50a) i (11.1.48a) se podudaraju.

b) Uzmimo sad slučaj *vandijagonalnih* matričnih elemenata u kojima je *razlika u po jednom stanju*. Neka među $m_1,...,m_N$ postoji $\overline{m}$ koji ne postoji među $m'_1,...,m'_N$ i neka $\overline{m}'$ ne postoji među prvima, a postoji među drugima; ostalih $(N-1)$ stanja neka su zajednički. Iz (11.1.49) je očigledno da nenultost postižemo, na primer, kad prvo i izaberemo tako da $m_i=\overline{m}$ itd.:

$$LS=\sum_{j=i+1}^{N}(-1)^{p(i<j)}[\langle m_i=\overline{m},m_j\mid\hat{V}_{12}\mid m'_{p_1}=\overline{m}',m'_{p_2}=m_j\rangle-\langle m_i=\overline{m},m=m_j\mid\hat{V}_{12}\mid m'_{p'_1}=m_j,m'_{p'_2}=\overline{m}'\rangle]+$$

$$\sum_{i=1}^{j-1}(-1)^{p(i<j)}(-1)^p[\langle m_i,m_j=\overline{m}\mid\hat{V}_{12}\mid m'_{p_1}=\overline{m}',m'_{p_2}=m_i\rangle-\langle m_i,m_j=\overline{m}\mid\hat{V}_{12}\mid m'_{p'_1}=m_i,m'_{p'_2}=\overline{m}'\rangle].$$

Znači zbir "$\sum_{i<j}$" se sveo na "$\sum_{j=i+1}^{N}$" odnosno na "$\sum_{i=1}^{j-1}$," a zbir "$\sum_{p\in S_N}$" na samo dva sabirka: "p", permutaciju koja dovodi $\overline{m}'$ i m_j na prvo i drugo mesto, a na mestima $3,...,N$ postiže isto kao u bra-u, i "p'", permutaciju koja je jednaka "p" primenjena posle transpozicije koja transponuje samo $\overline{m}'$ i m_i (otud minus ispred matričnog elementa) i analogno u drugom zbiru.

Delovanje permutacije $p(i<j)$ u zbiru "$\sum_{j=i+1}^{N}$" na $\langle m_1\mid\langle m_2\mid...\langle m_N\mid$ možemo zamisliti preko transponovanja: $\langle m_i=\overline{m}\mid$ transponujemo sa jednim po jednim od braova $\langle...\mid$ koji su pre njega i dovedemo ga na prvo mesto. Posle toga isto učinimo sa $\langle m_j\mid$ i dovedemo ga na drugo mesto. Usled $i<j$ imamo $\langle\overline{m}-m_i\mid<\langle m_j\mid$. Bra-ove ispred $\langle m_i=\overline{m}\mid$ "preskakali" su i $\langle\overline{m}\mid$ i $\langle m_j\mid$, doprinos ovih transpozicija u $(-1)^{p(i<j)}$ se potire. Ostaje samo broj bra-ova između $\langle\overline{m}\mid$ i $\langle m_j\mid$, tj. $(-1)^{p(i<j)}=(-1)^{b(\overline{m},m_j)}$. Permutaciju "p" (u istom zbiru) analogno razlažemo na transpozicije. Ali sad nemamo nužno $\mid\overline{m}'\rangle<\mid m_j\rangle$. Ako je $\mid m_j\rangle<\mid\overline{m}'\rangle$, onda $\mid\overline{m}'\rangle$ mora da "preskoči" i $\mid m_j\rangle$, tj. moramo računati jednu transpoziciju, više. Ali sve je to već ušlo u definiciju simbola $(-1)^{b(\overline{m}',m_j)}$, prema tome na njega se $(-1)^p$ svodi. Analogno rezonovanje primenjujemo i na zbir "$\sum_{i=1}^{j-1}$" i na $p(i<j)$ i p u njemu. Tako sledi

$$LS=\sum_{j=i+1}^{N}(-1)^{b(\overline{m},m_j)}(-1)^{b(\overline{m}',m_j)}(V_{\overline{m}m_j,\overline{m}'m_j}-V_{\overline{m}m_j,m_j\overline{m}'})+$$

$$\sum_{i=1}^{j-1}(-1)^{b(m_i,\overline{m})}(-1)^{b(\overline{m}',m_i)}(V_{m_i\overline{m},\overline{m}'m_i}-V_{m_i\overline{m},m_i\overline{m}'}).$$

Sad ćemo na osnovu simetričnosti operatora $\hat{V}_{12}$ u matričnim elementima $\hat{V}_{12}$ transponovati indekse levo od zapeta i istovremeno i indekse desno od zapete. Tako izraz u drugoj zagradi postaje $V_{\overline{m}m_i,m_i\overline{m}'}-V_{\overline{m}m_i,\overline{m}'m_i}$, odnosno $-(V_{\overline{m}m_i,\overline{m}'m_i}-V_{\overline{m}m_i,m_i\overline{m}'})$. Na osnovu (11.1.47) možemo $-(-1)^{b(m_i,\overline{m})}$ zameniti sa $(-1)^{b(\overline{m},m_i)}$. Sad preostaje samo da oba zbira obuhvatimo jednim i da pišemo umesto m_j i m_i samo m:

$$LS=\sum_{m\neq\overline{m};\nu_m=1}(-1)^{b(\overline{m},m)}(-1)^{b(\overline{m}',m)}(V_{\overline{m}m,\overline{m}'m}-V_{\overline{m}m,m\overline{m}'}),\qquad(11.1.50b)$$

što je očigledno jednako sa (11.1.48b), jer za $m=\overline{m}'$ u srednjoj zagradi dobijamo nulu (iskoristili smo simbol ν_m da izrazimo popunjenost stanja $\langle m \mid$ u $\langle m_1 \mid \langle m_2 \mid ...\langle m_N \mid$).

c) Na kraju, proučimo i *vandijagonalne* matrične elemente u kojima je razlika *u po dva stanja*. Drugim rečima, neka $\langle m_1 \mid \langle m_2 \mid ...\langle m_N \mid$ sadrži $\langle \overline{m}_1 \mid$ i $\langle \overline{m}_2 \mid$ koje ne sadrži $\mid m_1' \rangle \mid m_2' \rangle ... \mid m_N' \rangle$ i neka $\overline{m}_1<\overline{m}_2$, a neka ovaj N-čestični ket sadrži $\mid \overline{m}_1' \rangle$ i $\mid \overline{m}_2' \rangle$ koje pomenuti N-čestični bra ne sadrži i neka $\overline{m}_1'<\overline{m}_2'$; ostalih $N-2$ stanja neka su zajednička. Onda (11.1.49) daje

$$LS=(-1)^{p(i<j)}(-1)^{p}[\langle m_i=\overline{m}_1,m_j=\overline{m}_2 \mid \hat{V}_{12} \mid m_{p_1}'=\overline{m}_1',m_{p_2}'=\overline{m}_2' \rangle-$$

$$\langle m_i=\overline{m}_1,m_j=\overline{m}_2 \mid \hat{V}_{12} \mid m_{p_1'}'=\overline{m}_2',m_{p_2'}'=\overline{m}_1' \rangle].$$

Rezonovanjem kao pod b) dobijamo $(-1)^{p(i<j)}=(-1)^{b(\overline{m}_1,\overline{m}_2)}$, $(-1)^p=(-1)^{b'(\overline{m}_1',\overline{m}_2')}$, što dovodi do sledećeg konačnog rezultata:

$$LS=(-1)^{b(\overline{m}_1,\overline{m}_2)+b(\overline{m}_1',\overline{m}_2')}(V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_1'\overline{m}_2'}-V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_2'\overline{m}_1'}).\qquad(11.1.50c)$$

Ova se formula podudara sa (11.1.48c).

11.2 Sistemi identičnih bozona

Ovaj odeljak ima namenu da uvede čitaoca u formalizam druge kvantizacije za identične bozone. Cela materija je analogna istoimenom formalizmu za fermione, sa veoma važnom razlikom neograničenih brojeva popunjenosti jednobozonskih stanja i posledicama ove činjenice. Važnost bozonske verzije druge kvantizacije je mnogo manja nego fermionske verzije, jer u nerelativističkoj kvantnoj fizici ređe susrećemo sisteme identičnih bozona. Najosnovniji primer je sistem fotona, tj. kvantizirano elektromagnetno polje (ali ono se u potpunosti opisuje kvantnom elektrodinamikom, tj. relativističkom kvantnom teorijom fotona).

11.2.1 * Prostor druge kvantizacije za bozone

U ovom odeljku ćemo kvantno-mehanički formalizam maksimalno prilagoditi sledećoj pretpostavci: i) da imamo jednu određenu vrstu bozona, ii) da posmatramo naporedo kvantne sisteme od N (identičnih pomenutih) bozona, pri čemu $N \doteq 0,1,2,...$

Za zajedničko opisivanje pomenutih kvantnih sistema definiše se prostor stanja druge kvantizacije za (identične) bozone. Kao što smo videli u § 9.3.5 i u postulatu VIII (§ 9.3.6), prostor stanja za $N = 2, 3, ...$ identičnih bozona je simetrični ili bozonski potprostor $\mathcal{V}_s^{(N)} \stackrel{\rm def}{=} \mathcal{V}_s$:

$$\mathcal{V}_s^{(N=2)} \subset \mathcal{H}_{12}^{(u)}, \qquad \mathcal{V}_s^{(N=3)} \subset \mathcal{H}_{123}^{(u)}, ... \tag{11.2.1}$$

Prostor druge kvantizacije ili tzv. *Fock-ov prostor* za bozone, $\mathcal{H}_{II}^b$ je po definiciji

$$\mathcal{H}_{II}^b \stackrel{\rm def}{=} [\mathcal{H}_1^{(u)}]^0 \oplus \mathcal{H}_1^{(u)} \oplus \mathcal{V}_s^{(N=2)} \oplus \mathcal{V}_s^{(N=3)} \oplus ..., \tag{11.2.2}$$

gde je $[\mathcal{H}_1^{(u)}]^0$ (nulti simetrični stepen od $\mathcal{H}_1^{(u)}$) jednodimenzionalni prostor (pravac) koji obrazuje normirano stanje $|\,0\,\rangle$, tzv. bozonski *vakuum*. To je (jedno jedino) stanje fizičkog sistema koje ne sadrži nijedan bozon date vrste.

Sabirci u (11.2.2) se ponekad nazivaju simetrizovanim stepenima jadnobozonskog prostora $\mathcal{H}_1^{(u)}$.

Ako je bozon koji leži u osnovi prostora stanja $\mathcal{H}_1^{(u)}$ i $\mathcal{H}_{II}^b$ na primer pion ili kaon ili bilo koji drugi maseni bozon[11.2.1], onda važe sve primedbe sa kraja § 11.1.1, tj. stanja sa neodređenim brojem čestica nemaju fizičkog smisla, već služe samo za kompletiranje formalizma.

Međutim, ako se radi o bezmasenom bozonu, na primer o fotonu (koji prožima celu kvantnu fiziku preko ekscitacija i deekscitacija pobuđenih nivoa), stvari stoje sasvim drugačije. Videli smo u prvoj glavi da su talasni aspekti ponašanja EM polja, koji dolaze do izražaja prilikom propagacije EM zračenja, nekompatibini sa čestičnim aspektima ponašanja pa i sa opservablom broja fotona. Tako (netrivijalna) distribucija po broju fotona u čistom stanju sa ne-oštrim N dobija konkretni kvantnomahanički smisao (merenjem komplementarnog talasnog aspekta, koje izaziva tu distribuciju).

Kao što smo već pomenuli u § 11.1.1, u kvantnoj teoriji polja vakuum se mora veoma ozbiljno shvatiti jer je ne samo formalno neophodan, već ima i važan fizički smisao. Foton je relativistička čestica (kreće se brzinom svetlosti), stoga vakuum EM polja ima fizičkog smisla. I pri nerelativističkom opisivanju fotona (koje je egzaktno samo za neke aspekte, a u celini samo aproksimativno), prema tome vakuum ima fizičkog smisla, mada se u nerelativističkoj kvantnoj mahanici ne proučavaju fizičke osobine vakuuma (osim formalno).

11.2.2 Bazis brojeva popunjenosti

Postavlja se pitanje kako u $\mathcal{H}_{II}^b$ na najprostiji i najpraktičniji način izabrati bazis. Odgovor smo već dobili u T 9.4.1. Naka je $\{|\,n\,\rangle|\forall n\}$ *proizvoljan bazis* u jednobozonskom prostoru $\mathcal{H}_1^{(u)}$. Onda je

$$\{|\,0\,\rangle\} \cup \{|\,n\,\rangle|\forall n\} \cup \{|\,n_1, n_2\,\rangle|\text{sve različite kombinacije drugog reda sa ponavljanjem }\} \cup ... \tag{11.2.3}$$

bazis u $\mathcal{H}_{II}^b$ i to adaptiran na dekompoziciju (11.2.2) ("adaptiran" znači da je dotični bazis unija podbazisa koji su sa svoje strane bazisi pojedinih potprostora sabiraka u (11.2.2)).

[11.2.1] Treba imati u vidu da nisu poznata više-pionska niti više-kaonska vezana stanja u prirodi (osim tzv. "oblaka" od virtuelnih -tj. neopservabilnih- piona ili kaona unutar i okolo nukleona). Prema tome, $\mathcal{H}_{II}^b$ za pion ili kaon ima samo akademski smisao.

Zadatak 11.2.1 Pokazati da je konstanta normiranja u (9.4.1) $C_{n_1...n_N} = \sqrt{\frac{N!}{N_1!N_2!...}}$. Drugim rečima, treba pokazati da upotpunjena formula (9.4.1) glasi

$$| n_1 n_2 ... n_N \rangle = \sqrt{\frac{N_1!N_2!...}{N!}} \sum_{p \in S_N} \hat{P} \mid n_1 \rangle \mid n_2 \rangle ... \mid n_N \rangle, \tag{11.2.4}$$

gde je $N_1 \stackrel{\text{def}}{=} N(n_1)$, broj ponavljanja (zapravo broj pojavljivanja) vrednosti n_1 u datom skupu $n_1, n_2, ...n_N$, analogno $N_2 \stackrel{\text{def}}{=} N(n_2)$ je broj ponavljanja od n_2 ako je $n_2 \neq n_1$, (ako je $n_2 = n_1$, onda je N_2 broj ponavljanja prve vrednosti među $n_2, n_3, ...$ koja je različita od n_1) itd. (Indikacija: Izdvojiti podgrupu $(S_{N_1} \times S_{N_2} \times ...) \subseteq S_N$ reda $N_1!N_2!...$ svih permutaclja koje permutuju samo jednaka stanja u $\mid n_1 \rangle \mid n_2 \rangle ... \mid n_N \rangle$ i zamisliti S_N kao zbir koseta po pomenutoj podgrupi. Onda se $\sum_{p \in S_N} \hat{P} \mid n_1 \rangle ... \mid n_N \rangle$ svodi na $(N_1!N_2!...)$ puta zbir od $\frac{N!}{N_1!N_2!...}$ ortonormiranih sabiraka.)

Vektori bazisa (11.2.3) očigledno nisu dovoljno praktično izraženi. Da bismo otklonili ovaj nedostatak, prebrojimo vrednosti kvantnog broja n na fiksiran način (postavimo ih u biunivoku vezu sa rednim brojevima $m = 1, 2, ...$). Drugim rečima, prepišimo polazni bazis $\{| n \rangle | \forall n\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ na sledeći način:

$$\{| m \rangle | m = 1, 2, ...\} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}. \tag{11.2.5a}$$

Onda $\mid n_1 n_2 ... n_N \rangle$ možemo da izrazimo funkcijom ν_m, $m = 1, 2...$ čije su vrednosti $\nu_m \doteq 0, 1, 2....$ Vrednosti ν_m iskazuju koliko puta se vrednost m pojavljuje među $n_1, n_2, ..., n_N$ (u smislu pomenute biunivoke veze). Stoga $\mid n_1 n_2 ... n_N \rangle = \mid \nu_1 \nu_2 ... \rangle$ naravno, $\sum_{m=1}^{\infty} \nu_m = N$ i imamo jedinstven način zapisivanja svih vektora (11.2.3). Prema tome, (11.2.3) sad može da glasi

$$\{| \nu_1 \nu_2 ... \nu_N \rangle | \text{sve funkcije } \nu_m \text{ takve da } \sum_{m=1}^{\infty} \nu_m < \infty\} \subset \mathcal{H}_{II}^b. \tag{11.2.5b}$$

Bazis (11.2.5b) se naziva *bazisom brojeva popunjenosti*, jer ν_m je broj popunjenosti stanja $| m \rangle$ u $| n_1 n_2 ... n_N \rangle = | \nu_1 \nu_2 ... \rangle$. Reprezentacija koju definiše ovaj bazis naziva se *reprezentacijom brojeva popunjenosti*. Kada se proizvoljni vektor $| \psi \rangle \in \mathcal{H}_{II}^b$ razvija po vektorima bazisa (11.2.5b):

$$| \psi \rangle = \sum_{\nu_m} \psi_{\nu_1, \nu_2, ...} \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle, \tag{11.2.6}$$

onda sistem brojeva $(\psi_{\nu_1, \nu_2, ...})$ (uopštenje brojne kolone) reprezentuje ψ u (11.2.5b), tj. izražava dotično stanje u reprezentaciji brojeva popunjenosti. Treba zapaziti da su vektori u (11.2.5b) stanja sa određenim brojem bozona, dok u stanju $| \psi \rangle$ broj bozona ne mora imati oštru vrednost.

11.2.3 Kreacioni i anihilacioni operatori

Sad ćemo za svaku vrednost m kvantnog broja koji prebrojava bazisne vektore u našem fiksiranom bazisu (11.2.5a) definisati po jedan operator a_m :

$$\boxed{a_m \mid \nu_1, \nu_2, ... \nu_m, ... \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\nu_m} \mid \nu_1, \nu_2, ... \nu_m - 1, ... \rangle} \tag{11.2.7}$$

(ako je $\nu_m = 0$, $DS = 0$ i ne smeta što vektor na desnoj strani nije definisan).

To je tzv. *anihilacioni operator.* Definicija (11.2.7) se rečima iskazuje tako da a_m anihilira ili uništava jednobozonsko stanje $\mid m\rangle$ u N-bozonskom stanju $\mid \nu_1, \nu_2, ...\rangle$. Operator a_m je očigledno singularan.

Anihilacioni operator a_m se u odgovarajućem basisu brojeva popunjenosti (11.2.5b) reprezentuje matricom čiji su elementi:

$$\langle \nu_1', \nu_2', ... \mid a_m \mid \nu_1, \nu_2, ...\rangle = \sqrt{\nu_m}\delta_{\nu_1',\nu_1}...\delta_{\nu_m',\nu_m-1}. \tag{11.2.8}$$

Obeležimo sa $a_m^\dagger$ adjungovani operator od a_m. Pošto na matričnom jeziku adjungovanje znači kompleksno konjugovanje i transponovanje, iz (11.2.8) odmah sledi

$$\langle \nu_1', \nu_2', ... \mid a_m^\dagger \mid \nu_1, \nu_2, ...\rangle = \nu_m'^{\frac{1}{2}}\delta_{\nu_1',\nu_1}\delta_{\nu_2',\nu_2}...\delta_{\nu_m'-1,\nu_m}... = \sqrt{\nu_m+1}\delta_{\nu_1',\nu_1}\delta_{\nu_2',\nu_2}...\delta_{\nu_m',\nu_m+1}... \tag{11.2.9}$$

Zadatak 11.2.2 Objasniti kako iz prve jednakosti sledi druga u (11.2.9).

Iz (11.2.9) sledi

$$\boxed{a_m^\dagger \mid \nu_1, \nu_2, ..., \nu_m, ...\rangle = \sqrt{\nu_m+1} \mid \nu_1, \nu_2, ..., \nu_m+1, ...\rangle}. \tag{11.2.10}$$

Operatori $a_m^\dagger$ se nazivaju *kreacionim operatorima.* (11.2.10) se iskazuje tako da $a_m^\dagger$ kreira ili stvara jedno jednočestično stanje $\mid m\rangle$ u proizvoljnom stanju $\mid \nu_1, \nu_2, ...\rangle$.

Zadatak 11.2.3 Kako se vidi da a_m, $a_m^\dagger$ nisu ni hermitski ni unitarni operatori?

Sistem anihilaclonih i kreacionih operatora $a_m, a_m^\dagger$ $m = 1, 2...$ zadovoljava veoma praktične *komutacione relacije*:

$$\boxed{[a_m, a_m'] = 0 = [a_m^\dagger, a_{m'}^\dagger], \quad [a_m, a_{m'}^\dagger] = \delta_{mm'}, \quad \forall m, m'}. \tag{11.2.11a,b,c}$$

Zadatak 11.2.4 Dokazati prethodne jednakosti na dva načina: i) delovanjem na bazis (11.2.5b), ii) u reprezentaciji brojeva popunjenosti.

Zadatak 11.2.5 Da li operatori a_m i $a_m^\dagger$ spadaju u normalne operatore?

Zadatak 11.2.6 Pokazati da su a_m i $a_m^\dagger$ neograničeni (prekidni) operatori (ekvivalentnost a. i b. u S 2.5.1 važi i za nehermitske operatore)[11.2.2]

[11.2.2]Čak i da je $\mathcal{H}_1^{(u)}$ konačno-dimenzionalan (a u stvari $\dim \mathcal{H}_1^{(u)} = \aleph_0$), imali bismo $\dim \mathcal{H}_{II}^b = \aleph_0$. Stoga se u $\mathcal{H}_{II}^b$ pojavljuju neograničeni operatori, a, nažalost, osnovni operatori u $\mathcal{H}_{II}^b$, tj. a_m, $a_m^\dagger$ su takvi. Po želji, detaljnije o tome videti u referenci iz P1-11.1.3.

11.2.4 Operatori brojeva popunjenosti i operator broja čestica

Kreacioni operatori $a_m^\dagger$ mogu da posluže da se vektori bazisa brojeva popunjenosti (11.2.5b) izraze pomoću njih (u trećem vidu):

$$\mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle = \mid n_1 n_2 ... \rangle \frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! ...}} a_{n_1}^\dagger a_{n_2}^\dagger ... a_{n_N}^\dagger \mid 0 \rangle, \tag{11.2.12}$$

pri čemu je poredak popunjenih stanja $n_1 ... n_N$ arbitreran u drugom i u trećem izrazu (značenje brojeva N_1, N_2 itd. videti u Z 11.2.1).

Zadatak 11.2.7 Dokazati (11.2.12) izračunavanjem skalarnog proizvoda tekućeg bazisnog vektora $\langle \nu_1', \nu_2', ... \mid$ sa $\mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle$ iz (11.2.12) s jedne strane i sa $a_{n_1}^\dagger ... a_{n_N}^\dagger \mid 0 \rangle$ s druge.

Dakle, bazis (11.2.5b) sad glasi

$$\{ \frac{a_{n_1}^\dagger a_{n_2}^\dagger ... a_{n_N}^\dagger \mid 0 \rangle}{\sqrt{N_1! N_2! ...}} | \text{sve različite kombinacije } N\text{−tog reda sa ponavljanjem } N = 0, 1, 2, ... \}. \tag{11.2.13}$$

Zadatak 11.2.8 Pokazati da u $\mathcal{H}_{II}^b$ postoji jedan i (s tačnošću do brojnog umnoška) samo jedan vektor $\mid \psi \rangle$ za koji važi $a_m \mid \psi \rangle = 0$, $m = 1, 2, ...$ i da on pripada istom pravcu kao vakuum $\mid 0 \rangle$.

Dakle, vakuum karakteriše osobina

$$a_m \mid 0 \rangle = 0, \quad \forall m \tag{11.2.14}$$

i to za proizvoljni bazis $\{ \mid m \rangle | m = 1, 2, ... \} \subset \mathcal{H}_1^{(u)}$ ($\mid 0 \rangle$ je jedinstven i ne zavisi od izbora pomenutog bazisa).

Operatori $a_m^\dagger a_m$, $m = 1, 2, ...$ nazivaju se *operatorima brojeva popunjenosti* ili operatorima broja bozona u pojedinim stanjima m.

Zadatak 11.2.9 Pokazati da je (11.2.13) svojstveni bazis za bilo koji $a_m^\dagger a_m$ a odgovarajuće svojstvene vrednosti da su $\nu_m = N(m)$ tj. brojevi popunjenosti stanja $\mid m \rangle$ (ili brojevi ponavljanja, uporediti ispod (11.2.4)).

Zadatak 11.2.10 Pokazati da beskonačni niz operatora $a_m^\dagger a_m$ $m = 1, 2, ...$ čini kompletan skup kompatibilnih opservabli u $\mathcal{H}_{II}^b$ i da su brojevi $\nu_1, \nu_2, ...$ u vektorima njegovog zajedničkog svojstvenog bazisa (11.2.5b) u stvari svojstvene vrednosti ovih operatora.

Operator broja čestica u prostoru druge kvantizacije glasi:

$$\boxed{\hat{N} = \sum_{m=1}^{\infty} a_m^\dagger a_m}. \tag{11.2.15}$$

Zadatak 11.2.11 Dokazati ovaj iskaz.

11.2.5 Transformacione osobine, operatori simetrije, operatori polja

Transformaciona teorija bozonskih operatora druge kvantizacije je, naravno, isto tako važna kao analogna teorija za fermionske operatore. I po svojoj formi ja sasvim slična.

Lema 11.2.1 *Ako je u* $\mathcal{H}_1^{(u)}$ *zadato razvijanje novog basisa po starom*

$$\mid q\,\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} U_{qm} \mid m\,\rangle, \quad q = 1, 2, ..., \tag{11.2.16}$$

onda se u $\mathcal{H}_{II}^{b}$ *vektori koji se pojavljuju u odgovarajućim bazisima (11.2.13) transformišu na sledeći način:*

$$a_{q_1}^{\dagger} ... a_{q_N}^{\dagger} \mid 0\,\rangle = \sum_{m_1=1}^{\infty} ... \sum_{m_N=1}^{\infty} U_{q_1 m_1} ... U_{q_N m_N} a_{m_1}^{\dagger} ... a_{m_N}^{\dagger} \mid 0\,\rangle. \tag{11.2.17}$$

Dokaz: Odmah se vidi da iz (11.2.16) sledi

$$\sum_{p\in S_N} \hat{P} \mid q_1\,\rangle \mid q_2\,\rangle ... \mid q_N\,\rangle = \sum_{m_1} ... \sum_{m_N} U_{q_1 m_1} ... U_{q_N m_N} \sum_{p\in S_N} \hat{P} \mid m_1\,\rangle \mid m_2\,\rangle ... \mid m_N\,\rangle.$$

Jednakosti (11.2.4) i (11.2.12) daju $\frac{\sum_{p\in S_N} \hat{P}\mid q_1\,\rangle \mid q_2\,\rangle ... \mid q_N\,\rangle}{\sqrt{N!N_1!N_2!...}} = \mid q_1 q_2 ... q_N\,\rangle = \mid \nu_1 \nu_2 ...\,\rangle = \frac{a_{q_1}^{\dagger} a_{q_2}^{\dagger} ... a_{q_N}^{\dagger} \mid 0\,\rangle}{\sqrt{N_1!N_2!...}}$; stoga se dobijeno razvijanje svodi na:

$$\sqrt{N!} a_{q_1}^{\dagger} ... a_{q_N}^{\dagger} \mid 0\,\rangle = \sum_{m_1} ... \sum_{m_N} U_{q_1 m_1} ... U_{q_N m_N} \sqrt{N!} a_{m_1}^{\dagger} ... a_{m_N}^{\dagger} \mid 0\,\rangle.$$

Q. E. D.

Kao u slučaju fermiona, i sada imamo na desnoj strani od (11.2.17) redundanciju (suvišnost), tj. isti (nenormirani) bazisni vektor iz (11.2.13) pojavljuje se više puta.

Teorem 11.2.1 *Kreacioni operatori se transformišu kao ketovi, a anihilacioni kao braovi, tj. (11.2.16) ima za posledicu sledeće transformacije;*

$$\boxed{a_q^{\dagger} = \sum_{m=1}^{\infty} U_{qm} a_m^{\dagger}, \quad a_q = \sum_{m=1}^{\infty} U_{qm}^{*} a_m, \quad q = 1, 2...} \tag{11.2.18a,b}$$

Dokaz: (11.2.18a) adjungovanjem daje (11.2.18b). Da bismo dokazali (11.2.18a). primenićemo LS-u te jednakosti na $a_{q_2}^{\dagger} ... a_{q_N}^{\dagger} \mid 0\,\rangle$ i iskoristićemo (11.2.17):

$$a_q^{\dagger}(a_{q_2}^{\dagger} ... a_{q_N}^{\dagger} \mid 0\,\rangle) = \sum_{m} \sum_{m_2} ... \sum_{m_N} U_{qm} U_{q_2 m_2} ... U_{q_N m_N} a_m^{\dagger} a_{m_2}^{\dagger} ... a_{m_N}^{\dagger} \mid 0\,\rangle = (\sum_{m} U_{qm} a_m^{\dagger})(a_{q_2}^{\dagger} ... a_{q_N}^{\dagger} \mid 0\,\rangle).$$

Znači, leva strana i desna strana od (11.2.18a) jednako deluju na proizvoljni bazisni vektor[11.2.3] iz (11.2.13).
Q. E. D.

Što se tiče transformacija simetrije koje deluju kao unitarni operatori u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ (inverzija prostora, rotacije, translacije itd.), za bozone važi sve analogno kao za fermione. Isti je slučaj i sa antilinearnim unitarnim operatorom vremenske inverzije $\hat{\mathcal{J}}_v$.

Operatori polja $\psi^{\dagger}(\mathbf{r}, m_s)$, i $\psi(\mathbf{r}, m_s)$ se takođe definišu i koriste na isti način kao u slučaju fermiona.

[11.2.3] Iako su obe strane od (11.2.18a) linearni operatori, dati dokaz nije kompletan jer operatori nisu neprekidni i svugde definisani. Trabalo bi iskoristiti i zatvorenost operatora i povesti računa o domenina. Ali to se u kvantnoj mehanici uvek izostavlja.

11.2.6 Operator kinetičke energije, spoljašnjeg polja i interakcije

U jednobozonskom prostoru stanja $\mathcal{H}_1^{(u)}$ operator kinetičke energije glasi $\hat{T}_1 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m}$, a u $\mathcal{H}_{1\dots N}^{(u)}$ ili u $\mathcal{V}_S^{(N)}$ glasi

$$\hat{T}_{1\dots N} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{N} \hat{T}_i, \tag{11.2.19a}$$

gde je

$$\hat{T}_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hat{p}_i^2}{2m}. \tag{11.2.19b}$$

Analogno, kako god da glasi operator spoljašnjeg polja $\hat{V}_1$ u $\mathcal{H}_1^{(u)}$, istom funkcionalnom zavisnošću od osnovnog skupa opservabli dat je i operator $\hat{V}_i$ spoljašnjeg polja koja deluje na i-tu česticu (sve čestice su u "istom" polju, te su operatori $\hat{V}_i$ ekvivalentni). U prostoru N identičnih bozona deluje $\sum_{i=1}^{N} \hat{V}_i$.

Zadatak 11.2.12 Kako glasi operator kinetičke energije i operator spoljašnjeg polja koji deluju na vakuum $|\,0\rangle$? Dati fizičko obrazloženje za odgovor.

Operator spoljašnjeg polja $\sum_{i=1}^{N} \hat{V}_i$ je istog tipa kao operator kinetičke energije (11.2.19a). Oba spadaju u tzv. *aditivne operatore jednočetičnog tipa.* Veoma je značajno za formalizam druge kvantizacije da se takav operator izrazi kao što prostija funkcija kreacionih i anihilacionih operatora $a_m^\dagger$ i a_m.

Teorem 11.2.2 *Neka je u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ zadat proizvoljan jednobozonski operator $\hat{A}_1$ sa matricom $A = (A_{mm'} = \langle m \mid \hat{A}_1 \mid m' \rangle)$ koja ga reprezentuje u (proizvoljnom fiksiranom) bazisu $\{|\,m\,\rangle | m = 1, 2, \dots\}$. Onda aditivni operator jednočestičnog tipa $\hat{A}$ koji $\hat{A}_1$ definiše, tj. koji u pojedinim sabircima $\mathcal{V}_s^{(N)}$ iz (11.2.2) ima vid kao (11.2.19a) mutatis mutandis, u $\mathcal{H}_{II}^{b}$ glasi:*

$$\boxed{\hat{A} = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{m'=1}^{\infty} A_{mm'} a_m^\dagger a_{m'}}. \tag{11.2.20}$$

Dokaz u § 11.2.9.

Zadatak 11.2.13 Nabrojati opservable koje čine osnovni skup u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ i njihovo najvažnije funkcije. Koje od ovih opservabli po svom fizičkom smislu definišu u $\mathcal{H}_{II}^{b}$ aditivni operator jednočestičnog tipa?

Zadatak 11.2.14 Da li operator broja bozona $\hat{N}$ spada u aditivne operatore jednočestičnog tipa? Da li se može napisati u vidu (11.2.19a)?

Neka je interakcija dva bozona zadata operatorom $\hat{V}_{12}$ u $\mathcal{V}_s^{(N=2)} \subset \mathcal{H}_{12}^{(u)}$. Onda je interakcija i-tog i j-tog bozona u simetričnom potprostoru od $\mathcal{H}_{ij}^{(u)}$ izražena operatorom $\hat{V}_{ij}$ koja je ista funkcija odgovarajućeg osnovnog skupa opservabli u $\mathcal{H}_{ij}^{(u)}$ (tj. operatori $\hat{V}_{ij}$ i $\hat{V}_{12}$ su ekvivalentni). Kao što znamo, operator interakcije sistema od N identičnih bozona onda glasi

$$\sum_{i<j}^{N} \hat{V}_{ij}. \tag{11.2.21}$$

Tu se radi o *aditivnom operatoru dvočestičnog tipa.* Sad ćemo i ovaj operator izraziti na jeziku druge kvantizacije.

Teorem 11.2.3 *Neka je $\hat{V}_{12}$ operator interakcije dva bozona i neka matrica koja ga reprezentuje u bazisu $\{| m\rangle_1 | m'\rangle_2 | m, m' = 1, 2, \ldots\}$ u $\mathcal{H}_{12}^{(u)}$ glasi $V_{12}(V_{m_1 m_2, m'_1 m'_2} \stackrel{\text{def}}{=} \langle m_1, m_2 | \hat{V}_{12} | m'_1, m'_2 \rangle)$, gde je na primer $| m'_1, m'_2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} | m'_1 \rangle \otimes | m'_2 \rangle$ itd. Onda $\hat{V}_{12}$ definiše u $\mathcal{H}_{II}^b$ sledeći aditivni operator dvočestičnog tipa, tj. operator interakcije:*

$$\boxed{\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{m_1=1}^{\infty} \sum_{m_2=1}^{\infty} \sum_{m'_1=1}^{\infty} \sum_{m'_2=1}^{\infty} V_{m_1 m_2, m'_1 m'_2} a_{m_1}^\dagger a_{m_2}^\dagger a_{m'_1} a_{m'_2}}. \tag{11.2.22}$$

Dokaz videti u Dodatku § 11.2.10.

Značaj formula (11.2.17) i (11.2.22) je u tome što je u $\mathcal{H}_{II}^b$ osnovni bazis baš bazis brojeva popunjenosti i to u vidu (11.2.13). U tom bazisu se onda računaju matrični elementi operatora $\hat{A}$ ili $\hat{V}$.

11.2.7 Harmonijski oscilator

U (9.2.3) imali smo hamiltonijan trodimenzionalnog izotropnog harmonijskog oscilatora:

$$\hat{H} = \sum_{q=x,y,z} \left(\frac{\hat{p}_q^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\right)\hat{q}^2). \tag{11.2.23}$$

Definišimo

$$a_q \doteq \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} + \imath\sqrt{2m\hbar\omega}\hat{p}_q, \quad q = x, y, z. \tag{11.2.24a}$$

Adjungovanje daje

$$a_q^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} - \frac{\imath}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_q, \quad q = x, y, z. \tag{11.2.24b}$$

Novi operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[a_q, a_{q'}] = [a_q^\dagger, a_{q'}^\dagger] = 0, \quad [a_q, a_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'}, \quad q = x, y, z. \tag{11.2.25}$$

Zadatak 11.2.15 Pokazati da usled $[\hat{q}, \hat{p}_q] = \imath\hbar$, $q = x, y, z$, iz (11.2.24) sledi (11.2.25).

Dakle, imamo po tri bozonska kreaciona i anihilaciona operatora. Istražimo njihovu relevantnost za rešavanje svojstvenog problema hamiltonijana (11.2.23).

Definišimo operatore brojeva popunjenosti i operator broja bozona:

$$\hat{N}_q = a_q^\dagger a_q, \quad q = x, y, z; \quad \hat{N} = \sum_{q=x,y,z} \hat{N}_q. \tag{11.2.26a,b}$$

Hamiltonijan (11.2.23) se sad svodi na:

$$\boxed{\hat{H} = (\hat{N} + \tfrac{3}{2})\hbar\omega}. \tag{11.2.27}$$

Zadatak 11.2.16 Dokazati (11.2.27).

Neka su $n = 0, 1, 2, ...$ svojstvene vrednosti od $\hat{N}$, onda se iz (11.2.27) vidi da je spektar hamiltonijana

$$\{E_n = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega | n = 0, 1, 2...\}, \tag{11.2.28}$$

što se, naravno, poklapa sa (9.2.21a). Pokušajmo sad da izračunamo svojstveni bazis od $\hat{H}$.

Neka su n_q brojevi popunjenosti, tj. svojstvene vrednosti od $\hat{N}_q$, $q = x, y, z$. Pretpostavimo da u orbitnom prostoru stanja $\mathcal{H}_o$ trodimenzionalnog harmonijskog oscilatora postoji vakuum $\mid 0 \rangle$, tj. stanje definisano sa

$$a_q \mid 0 \rangle = \mid 0 \rangle, \quad q = x, y, z \tag{11.2.29}$$

(niže ćemo potvrditi ovu pretpostavku). Formirajmo onda bazis brojeva popunjenosti

$$\{\mid n_x n_y n_z \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y! n_z!}} (a_x^\dagger)^{n_x} (a_y^\dagger)^{n_y} (a_z^\dagger)^{n_z} \mid 0 \rangle | n_q = 0, 1, 2, ...; q = x, y, z\} \tag{11.2.30}$$

(uporediti (11.2.12), sada je $N_1 = n_x$ itd.; vakuum je $\mid 0 \rangle = \mid 000 \rangle$).

Da je (11.2.30) svojstveni bazis hamiltonijana $\hat{H}$ datog sa (11.2.27) je očigledno kad se (11.2.27) prepiše detaljnije u vidu

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z = [(\hat{N}_x + \frac{1}{2}) + (\hat{N}_y + \frac{1}{2}) + (\hat{N}_z + \frac{1}{2})]\hbar\omega. \tag{11.2.31}$$

Iz (11.2.26b) se vidi da je $n = n_x + n_y + n_z$, što uspostavlja vezu između svojstvonih vektora u (11.2.30) i svojstvenih vrednosti u (11.2.28).

Čitaocu koji je ponovo prelistao odeljak § 9.2 očigledno je da je kvantni broj n_x ovog paragrafa isti kao kvantni broj n_x u § 9.2.3 i analogno važi za n_y i n_z. Vakuum $\mid 000 \rangle$ je osnovno stanje (uporediti (9.2.23)) i otud znamo da postoji (što smo gore ostali dužni).

Da rezimiramo. Uspeli smo svesti orbitni prostor $\mathcal{H}_o$ trodimenzionalnog harmonijskog oscilatora na bozonski prostor $\mathcal{H}_{II}^b$, čiji jednobozonski prostor ima samo tri ortonormirana stanja, recimo $\mid x \rangle$, $\mid y \rangle$ i $\mid z \rangle$, koji ga obrazuju. To je primer bazisa (11.2.5a). Kvantni brojevi n_q, odgovaraju opservablama popunjenosti ovih stanja $\hat{N}_q$, $q = x, y, z$.

11.2.8 Kompatibilnost vrednosti kvantnih brojeva N i L

U ovom paragrafu ćemo dokazati relacije (9.2.27). U tu svrhu preći ćemo na nove anihilacione operatore:

$$A_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - \imath a_y), \quad A_0 \stackrel{\text{def}}{=} a_z, \quad A_{-1} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + \imath a_y) \tag{11.2.32}$$

i na njihove adjungovane operatore $A_1^\dagger, A_0^\dagger$ i $A_{-1}^\dagger$.

Zadatak 11.2.17 Pokazati da novi anihilacioni i kreacioni operatori zadovoljavaju bozonske komutacione relacije, tj. relacije analogne sa (11.2.25).

Kada se definišu novi operatori brojeva popunjenosti

$$\hat{N}_1 = A_1^\dagger A_1, \quad \hat{N}_0 = A_0^\dagger A_0, \quad \hat{N}_{-1} A_{-1}^\dagger A_{-1}, \tag{11.2.33}$$

onda pored $\hat{N} = \hat{N}_x + \hat{N}_y + \hat{N}_z$ (i $n = n_x + n_y + n_z$) važi i

$$\hat{N} = \hat{N}_1 + \hat{N}_0 + \hat{N}_{-1}, \quad \boxed{n = n_1 + n_2 + n_3}. \tag{11.2.34a,b}$$

To daje novi svojstveni bazis hamiltonijana (uporediti (11.2.27) i (11.2.28)):

$$\{|\, n_1 n_0 n_{-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_0! n_{-1}!}} (A_1^\dagger)^{n_1} (A_0^\dagger)^{n_0} (A_{-1}^\dagger)^{n_{-1}} \mid 000 \rangle | n_1, n_0, n_{-1} = 0, 1, 2, ...\}. \tag{11.2.35}$$

Zadatak 11.2.18 Dokazati (11.2.34).

Za našu svrhu je važno da na jeziku novih bozonskih operatora imamo

$$\hat{l}_z = (\hat{N}_1 - \hat{N}_{-1})\hbar. \tag{11.2.36}$$

Zadatak 11.2.19 Dokazati (11.2.36).

Iz (11.2.36) odmah sledi

$$m = n_1 - n_{-1}. \tag{11.2.37}$$

Ako rešimo (11.2.34b) po n_{-1} i zamenimo to rešenje u (11.2.37), imaćemo

$$\boxed{m = (2n_1 - n) + n_0}. \tag{11.2.38}$$

Naš je cilj da svojstveni potprostor $\mathcal{V}(E_n)$ hamiltonijana dekomponujemo na svojstvene potprostore od $\mathbf{l}^2$:

$$\mathcal{V}(E_n) = \oplus_l \mathcal{V}_l. \tag{11.2.39}$$

Zapravo, zanima nas manje od toga; samo to koje se vrednosti od l pojavljuju u sumi (11.2.39) i sa kojim višestrukostima d_l (d_l je dužina fioka u ormanu $\mathcal{V}_l$, uporediti 6.2 sa $k = l$).

Postupićemo analogno kao u § 7.1.3 i § 7.1.4 pri slaganju uglovnih elemenata. Izvršićemo dekompoziciju

$$\mathcal{V}(E_n) = \oplus_m \mathcal{V}_m. \tag{11.2.40}$$

gde su $\mathcal{V}_m$ svojstveni potprostori od l_z unutar $\mathcal{V}(E_n)$ (to su nanizane fioke sa istim m sa C 7.1. Izračunaćemo $\dim \mathcal{V}_m$, pa ćemo na osnovu formula (7.1.7)- i (7.1.9) doći do

$$\boxed{d_l = \dim \mathcal{V}_{m=l} - \dim \mathcal{V}_{m=l+1}, \quad \forall l}. \tag{11.2.41}$$

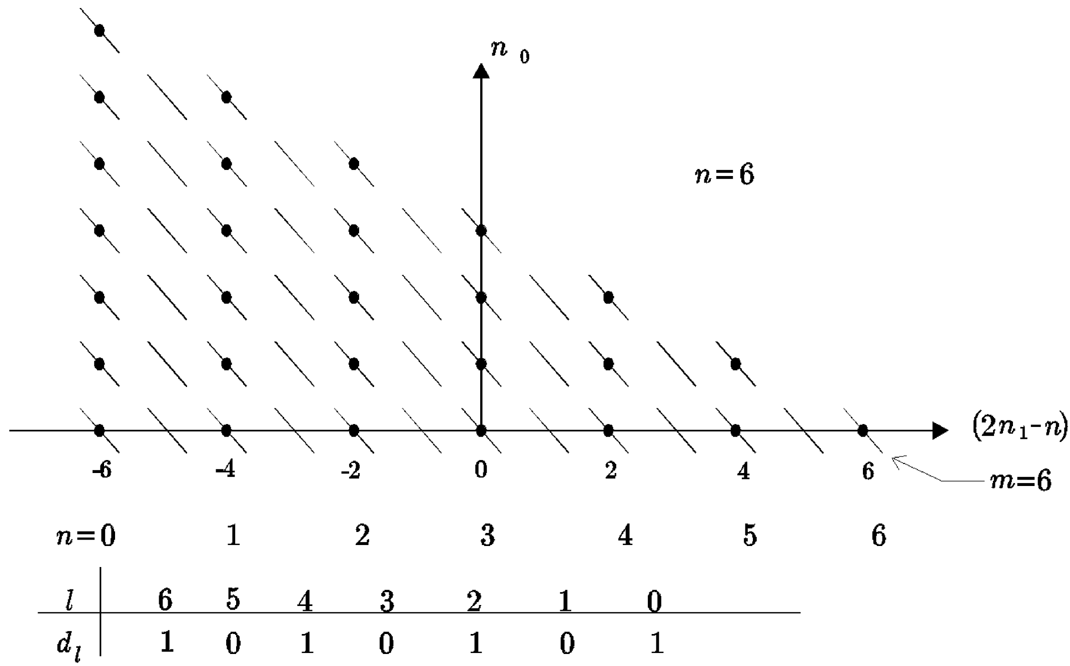
U punoj analogiji sa C 7.2, skupovi tačaka na Crtežu koje povezuju kose isprekidane linije predstavljaju pomenute bazisne vektore koji obrazuju pojedine potprostore $\mathcal{V}_m$. Broj tačaka na takvoj liniji je, očigledno, dimenzija od $\mathcal{V}_m$.

Koje su moguće vrednosti za n_1 za dato n zaključujemo iz (11.2.34b). Iz iste formule vidimo i moguće vrednosti za n_0 za dato n i n_1 (jer $n_1, n_0, n_{-1} \doteq 0, 1, 2, ...$). Vrednosti m koje odgovaraju pojedinim isprekidanim linijama (potprostorima $\mathcal{V}_m$) izračunavamo iz (11.2.38). Najzad, iz (11.2.41) sledi (brojeći tačke na susednim isprekidanim linijama) rezultat tabeliran na dnu Crteža.

U opštem slučaju, tj. za proizvoljnu vrednost kvantnog broja energije n, naš konačni zaključak glasi:

$$l = n, n-2, n-4, ..., \begin{cases} 0, & \text{za n parno,} \\ 1, & \text{za n neparno.} \end{cases} . \tag{11.2.42}$$

To je (9.2.27), što smo i hteli da dokažemo.



Slika 11.1: **Degeneracija energija izotropnog trodimenzionalnog harmonijskog oscilatora**. *Za $n = 6$ nanesene su sve tačke $(2n_1 - n, n_0)$ koje odgovaraju dotičnoj fiksiranoj vrednosti od n. Tačke predstavljaju svojstvene vektore $\mid n_1 n_0 n_{-1} \rangle$ iz bazisa (11.2.35) kojima odgovara zajednički degenerisani nivo $E_n = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega$.*

11.2.9 Dodatak - dokaz teorema 2

A) Počećemo izračunavanjem matričnih elemenata od (11.2.17) u bazisu brojeva popunjenosti (11.2.5b) (imajući u vidu (11.2.7) kao i bra-oblik od (11.2.7)):

$$\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid \sum_{mm'} A_{mm'} a^\dagger_m a_{m'} \mid \nu'_1, \nu'_2, ... \rangle = \sum_{mm'} A_{mm'} \sqrt{\nu_m \nu'_{m'}} \langle\, \nu_1, ..., \nu_m - 1, ... \mid \nu'_1, ..., \nu'_{m'} - 1, ... \rangle = \tag{11.2.43}$$
$$\sum_{mm';m\neq m'} A_{mm'} \sqrt{\nu_m \nu'_{m'}} \delta_{\nu_1\nu'_1} ... \delta_{\nu_m - 1, \nu'_m} ... \delta_{\nu_{m'}, \nu'_{m'} - 1} ... + \sum_m A_{mm} \nu_m \delta_{\nu_1 \nu'_1} ... \delta_{\nu_m, \nu'_m} ...$$

Iz (11.2.43) vidimo da dijagonalni elementi glase de

$$\langle \nu_1, \nu_2, ... \mid \sum_{mm'} A_{mm'} a^\dagger_m a_{m'} \mid \nu_1, \nu_2, ... \rangle = \sum_{m;\nu_m>0} \nu_m A_{mm}, \tag{11.2.44a}$$

a nedijagonalni su različiti od nule samo ako $N \stackrel{\text{def}}{=} \sum_m \nu_m = N' \stackrel{\text{def}}{=} \sum_m \nu'_m$ i ako $\nu_m = \nu'_m$ za $\forall m$ osim recimo za $m = \overline{m}_1, \overline{m}_2$; a tu a tu mora biti $\nu_{\overline{m}_1} = \nu'_{\overline{m}_1} + 1$ i $\nu_{\overline{m}_2} + 1 = \nu'_{\overline{m}_2}$. Ako sve ovo jeste slučaj onda

$$\langle \nu_1, ...\nu_{\overline{m}_1}, ..., \nu_{\overline{m}_2}, ... \mid \sum_{mm'} A_{mm'} a^\dagger_m a'_m \mid \nu'_1, ..., \nu'_{\overline{m}_1}, ..., \nu'_{\overline{m}_2}, ... \rangle = \sqrt{\nu_{m_1} \nu'_{m_2}} A_{\overline{m}_1 \overline{m}_2}. \tag{11.2.44b}$$

B) Sad ćemo izračunati matrične elemente našeg operatora jednočestičnog tipa $\sum_{i=1}^{N}\hat{A}_i$ u bazisu (9.4.1) (uporediti i (11.2.4) u ovom odeljku), znači u potprostoru $\mathcal{V}_s^{(N\geq 1)}$:

$$\langle n_1 n_2 ... n_N \mid \sum_{i=1}^{N}\hat{A}_i \mid n_1' n_2' ... n_N' \rangle = N! \frac{\langle n_1 \mid \langle n_2 \mid ... \langle n_N \mid \hat{S}\sum_i \hat{A}_i \hat{S} \mid n_1' \rangle \mid n_2' \rangle ... \mid n_N' \rangle}{\sqrt{N_1! N_2! ... N_1'! N_2'! ...}}.$$

Obeležićemo brojni faktor na desnoj strani sa $N!C$ i iskoristićemo relacije: $\hat{S}\sum_i \hat{A}_i = \sum_i \hat{A}_i \hat{S}$ (simetričnost) i $\hat{S}^2 \hat{S} = \frac{1}{N!}\sum_{p\in S_N}\hat{P}$. Osim toga, relacija (9.3.17), $\hat{P} \mid n_1 \rangle ... \mid n_N \rangle = \mid n_{p_1^{-1}} \rangle ... \mid n_{p_N^{-1}} \rangle$ daje $\hat{S} \mid n_1 \rangle ... \mid n_N \rangle = \frac{1}{N!}\sum_{p\in S_N} \mid n_{p_1} \rangle ... \mid n_{p_N} \rangle$ (prešli smo sa p na p^{-1} , koji prelazi isti skup S_N).

Zahvaljujući svemu tome je $LS = C\sum_{i=1}^{N}\sum_{p\in S_N} \langle\, n_1 \mid n_{p_1}' \rangle ... \langle n_i \mid \hat{A}_i \mid n_{p_i}' \rangle \langle\, n_N \mid n_{p_N}' \rangle$.

Neka je $S_{N_1'} \times S_{N_2'} \times \subseteq S_N$ podgrupa koja se sastoji od svih permutacija koje permutuju samo jednaka stanja i neka je $S_N = \sum' p' S_{N_1'} \times S_{N_2'} \times ...$ odgovarajuće razlaganje S_N na disjunktne podskupove koji se nazivaju susednim klasama po podgrupi. Suma "$\sum'$" je po klasama, a p' je arbitrerni predstavnik klase (po jedan iz svake klase!), u samoj podgrupi p' je jedinični element.

Pošto permutacije iz $S_{N_1'} \times S_{N_2'} \times ...$ "ne rade ništa" (permutuju samo jednaka stanja), sve permutacije iz $p' S_{N_1'} \times S_{N_2'} \times ...$ deluju jednako, te zbir po permutacijama te klase daje isto kao $(N_1'! N_2'! ...)p'$. Uzimajući u obzir šta je C, dalje sledi:

$$LS = \sqrt{\frac{N_1'! N_2'! ...}{N_1! N_2! ...}} \sum_{i=1}^{N} {\sum}' \langle\, n_1 \mid n_{p_1'}' \rangle ... \langle n_i \mid \hat{A}_i \mid n_{p_i'}' \rangle ... \langle\, n_N \mid n_{p_N'}' \rangle. \qquad (11.2.45)$$

Proučimo prvo *dijagonalne* matrične elemente. Brojni faktori se potiru. Permutacije p' izazivaju promenu u dva jednočestična vektora, te se sabirak sa p' u (11.2.45) može svesti na nulu. Nulu nećemo dobiti jedino ako uzmemo da je p' jedinična permutacija. Stoga $LS = \sum_i \langle n_i \mid \hat{A}_i \mid n_i \rangle = \sum_i A_{n_i,n_i}$. Ako jednobozonski bazis pišemo kao $\{\mid m \rangle | m = 1,2,...\}$ (uporediti (11.2.5a)), a brojeve ponavljanja $N_1, N_2, ...$ pišemo kao brojeve popunjenosti ν_m, onda

$$LS = \sum_{m;\nu_m>0} \nu_m A_{mm}. \qquad (11.2.46a)$$

Pređimo na *nedijagonalne* matrične elemente. Iz (11.2.45) vidimo da u slučaju da se bra $\langle n_1 \mid ... \langle n_N \mid$ i ket $\mid n_1' \rangle ... \mid n_N' \rangle$ razlikuju više nego u jednom stanju (s tačnošću do permutacije), onda je svaki sabirak u (11.2.45) nula. Prema tome, ograničimo se na slučaj da pomenuti bra sadrži, recimo, stanje $\langle \overline{m}_1 \mid$ jedanput više nego pomenuti ket, a da ovaj, recimo, sadrži stanje $\mid \overline{m}_2 \rangle$ jedanput više nego bra. Onda nultost sabiraka možemo izbeći samo ako $\sum'$ opet ograničimo na p' koji dovodi do podudaranja jednočestičnih braova i ketova osim u faktoru sa $\hat{A}_i$. Ovaj faktor treba da bude $\langle \overline{m}_1 \mid \hat{A}_i \mid \overline{m}_2 \rangle = A_{\overline{m}_1 \overline{m}_2}$. Pošto $\mid n_i \rangle = \mid \overline{m}_1 \rangle$, možemo postići sa $\nu_{\overline{m}_1}$ vrednosti od i, $\nu_{\overline{m}_1}$ sabiraka iz "$\sum_{i=1}^{N}$" daju isto. Jednaki faktorijeli se potiru i ostaje $LS = \sqrt{\frac{\nu_{\overline{m}_1}'! \nu_{\overline{m}_2}'!}{\nu_{\overline{m}_1}! \nu_{\overline{m}_2}!}} \nu_{\overline{m}_1} A_{\overline{m}_1 \overline{m}_2}$.

Imajući u vidu $\nu_{\overline{m}_2}' - 1 = \nu_{\overline{m}_2}$ i $\nu_{\overline{m}_1} - 1 = \nu_{\overline{m}_1}'$, imamo $LS = \sqrt{\frac{\nu_{\overline{m}_1}'! \nu_{\overline{m}_2}'! \nu_{\overline{m}_2}!}{\nu_{\overline{m}_1}! \nu_{\overline{m}_1}'! \nu_{\overline{m}_2}!}} \nu_{\overline{m}_1} A_{\overline{m}_1 \overline{m}_2}$, i na kraju,

$$LS = \sqrt{\nu_{\overline{m}_2}' \nu_{\overline{m}_1}} A_{\overline{m}_1 \overline{m}_2}. \qquad (11.2.46b)$$

Pošto se (11.2.44*a*) podudara sa (11.2.46*a*), a (11.2.44*b*) sa (11.2.46*b*), Teorem T 11.2.2 je dokazan za $N \geq 1$. Za $N = 0$, imamo s jedne strane $\langle 0 \mid \sum_{mm'} A_{mm'} a^\dagger_m a_{m'} \mid 0 \rangle = 0$, a s druge strane $\langle 0 \mid 0 \mid 0 \rangle = 0$, jer po fizičkom smislu aditivnosti kad nema bozona ne deluje ništa (odgovor na Zadatak Z 11.2.11).

11.2.10 Dodatak - dokaz teorema 3

A) Opet ćemo prvo izračunati matrične elemente od (11.2.22) u bazisu brojeva popunjenosti (11.2.5*b*):

$$LS \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}\langle \nu_1, \nu_2, \ldots \mid \sum_{m_1 m_2, m'_1 m'_2} V_{m_1 m_2, ' _1 m'_2} a^\dagger_{m_1} a^\dagger_{m_2} a_{m'_1} a_{m'_2} \mid \nu'_1, \nu'_2, \ldots \rangle = \tag{11.2.47}$$

$$\frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2, m'_1 m'_2} V_{m_1 m_2, ' _1 m'_2} \langle \nu_1, \nu_2, \ldots \mid a^\dagger_{m_1} a^\dagger_{m_2} a_{m'_1} a_{m'_2} \mid \nu'_1, \nu'_2, \ldots \rangle.$$

Očigledno, $LS = 0$ osim ako $N \stackrel{\text{def}}{=} \sum_m \nu_m \geq 2$ i $N' \stackrel{\text{def}}{=} \sum_m \nu'_m \geq 2$. Dalje, iz (11.2.7) sledi

$$\langle \nu_1, \nu_2, \ldots \mid a^\dagger_{m_1} a^\dagger_{m_2} = \begin{cases} \langle \nu_1, \ldots \nu_{m_1} - 1, \ldots, \nu_{m_2} - 1, \ldots \mid \sqrt{\nu_{m_1} \nu_{m_1}}, & m_1 \neq m_2 \\ \langle \nu_1, \ldots \nu_{m_1} - 2, \ldots \mid \sqrt{\nu_{m_1}(\nu_{m_1} - 1)}, & m_1 = m_2 \end{cases}. \tag{11.2.48a,b}$$

$$\langle a_{m'_1} a_{m'_2} = \nu'_1, \nu'_2, \ldots \mid \begin{cases} \sqrt{\nu'_{m'_1} \nu'_{m'_1}} \langle \nu'_1, \ldots \nu'_{m'_1} - 1, \ldots, \nu'_{m'_2} - 1, \ldots \mid, & m'_1 \neq m'_2 \\ \sqrt{\nu'_{m'_1}(\nu'_{m'_1} - 1)} \langle \nu'_1, \ldots \nu'_{m'_1} - 2, \ldots \mid, & m'_1 = m'_2 \end{cases}. \tag{11.2.48c,d}$$

Vektor $\langle \nu_1, \nu_2, \ldots \mid$ pominjaćemo kao "bra", a vektor $\mid \nu'_1, \nu'_2, \ldots \rangle$ kao "ket". Naš prvi zaključak iz (11.2.47) i (11.2.48) glasi da je LS$\neq 0$ samo ako $N = N'$, tj. ako se broj bozona u bra-u i broj bozona u ket-u podudaraju, jer novi bra dat sa (11.2.48*a*)-(11.2.48*b*) ima $N - 2$ bozona, a novi ket dat sa (11.2.48*c*)-(11.2.48*d*) ima $N' - 2$ bozona. Razne mogućosti bra-a i ket-a koje daju $LS \neq 0$ podelićemo u 6 klasa i izračunaćemo levu stranu za svaku od njlh.

a) *Dijagonalni* matrični elementi, tj. $\nu_m = \nu'_m$, $m = 1, 2, \ldots$ Od četiri mogućnosti koje dopuštaju jednakosti (11.2.48), jasno je da nenulti doprinos daju samo sabirci u (11.2.47) za koje je $m_1 = m_2$ i $m'_1 = m'_2 = m_1$, kao i sabirci za koje je $m_1 \neq m_2$, $m'_1 \neq m'_2$, ali $\{m_1, m_2\} = \{m'_1, m'_2\}$. Prema tome, u ovom slučaju

$$LS = \frac{1}{2} \sum_{m, \nu_m \geq 2} \nu_m(\nu_m - 1) V_{mm,mm} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ \nu_{m_1} \geq 1, \nu_{m_2} \geq 1}} \nu_{m_1} \nu_{m_2} (V_{m_1 m_2, m_1, m_2} + V_{m_1 m_2, m_2, m_1}) \tag{11.2.49a}$$

(ispod sume su naznačeni uslovi na sabirke u zbiru).

Sledećih 5 klasa obuhvataju *nedijagonalne* matrične elemente. Naredne dve klase karakteriše okolnost da se brojevi popunjenosti razlikuju tačno *za dve vrednosti* kvantnog broja, pišemo ih $\overline{m}_1$ i $\overline{m}_2$. Za ovaj slučaj nema više od dve mogućnosti usled $N = N'$.

b) $\nu_{\overline{m}_1} = \nu'_{\overline{m}_1} + 1$, $\nu_{\overline{m}_2} + 1 = \nu'_{\overline{m}_2}$ (ostali $\nu_m = \nu'_m$):

$$LS = [\frac{1}{2} 2 \sqrt{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1} - 1)(\nu'_{\overline{m}_1}) \nu'_{\overline{m}_2}} V_{\overline{m}_1 \overline{m}_1, \overline{m}_1 \overline{m}_2}] + \sqrt{\nu_{\overline{m}_1} \nu_{\overline{m}_2} \nu'_{\overline{m}_2} (\nu'_{\overline{m}_2} - 1)} V_{\overline{m}_1 \overline{m}_2, \overline{m}_2 \overline{m}_2}] +$$

$$\sum_{m;\nu_m\geq 1}\sqrt{\nu_m\nu_{\overline{m}_1}\nu'_{\overline{m}_2}\nu_m}(V_{m\overline{m}_1,m\overline{m}_2}+V_{m\overline{m}_1,\overline{m}_2 m}).$$

Naime, u (11.2.47) doprinose samo sabirci takvi da se pojavljuju $a^\dagger_{\overline{m}_1}$ i $a_{\overline{m}_2}$, tj. da se i u bra-u i u ket-u anihilira stanje koje (jedino) "štrči" (inače će bra i ket iz (11.2.48) dati nulu). Onda, postoje tri mogućnosti: da drugi kreacioni operator bude opet $a^\dagger_{\overline{m}_1}$ (samo ako je $\nu_{\overline{m}_1}\geq 2$, ali brojni faktor $\nu_{\overline{m}_1}-1$ o tome automatski vodi računa, tj. poništava ceo sabirak ako je $\nu_{\overline{m}_1}=1$), da bude $a^\dagger_{\overline{m}_2}$ i, najzad, da bude nešto treće. To mora biti kompenzovano u svakoj od ovih mogućnosti istim anihilacionim operatorom. Srednje zagrade odgovaraju pojedinim pomenutim mogućnostima. U prvoj faktori odmah slede iz (11.2.47) i (11.2.48), a pošto postoje dve podmogućnosti u (11.2.47), $m'_1=\overline{m}_1$, $m'_2=\overline{m}_2$ i $\overline{m}'_1=\overline{m}_2$, $\overline{m}'_1=\overline{m}_1$, imamo $(V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_1\overline{m}_2}+V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_1})=2V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_1\overline{m}_2}$.

U drugoj srednjoj zagradi je sve analogno, samo što se podmogućnosti odnose na m_1 i m_2. U trećoj neposredno dobijamo četiri matrična elementa, ali usled simetričnosti svode se na dva pomnožena faktorom 2.

Uzimajući u obzir pretpostavke $\nu_{\overline{m}_1}-1=\nu'_{\overline{m}_1}$, $\nu'_{\overline{m}_2}-1=\nu_{\overline{m}_2}$ i $\nu_m=\nu'_m$ za ostale m, gornju jednakost možemo napisati u sledećoj sređenoj formi:

$$LS=\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}}\nu'_{\overline{m}_1}\sqrt{\nu'_{\overline{m}_2}}V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_1\overline{m}_2}+\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}}\nu_{\overline{m}_2}\sqrt{\nu'_{\overline{m}_2}}V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_2\overline{m}_2}+ \tag{11.2.49b}$$
$$\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}\nu'_{\overline{m}_2}}\sum_{m;\nu_m\geq 1,m\neq\overline{m}_1,\overline{m}_2}\nu_m(V_{m\overline{m}_1,m\overline{m}_2}+V_{m\overline{m}_1,\overline{m}_2 m}).$$

c) $\nu_{\overline{m}_1}=\nu'_{\overline{m}_1}+2$, $\nu_{\overline{m}_2}+2=\nu'_{\overline{m}_2}$ (ostali $\nu_m=\nu'_m$):

$$LS=\frac{1}{2}\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1}-1)\nu'_{\overline{m}_2}(\nu'_{\overline{m}_2}-1)}V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_2}. \tag{11.2.49c}$$

Sledeće dve klase karakteriše razlika u brojevima popunjenosti tačno *za tri vrednosti* kvantnog broja, obeležavamo ih sa $\overline{m}_1$, $\overline{m}_2$ i $\overline{m}_3$.

d) $\nu_{\overline{m}_1}=\nu'_{\overline{m}_1}+1$, $\nu_{\overline{m}_2}=\nu'_{\overline{m}_2}+1$, $\nu_{\overline{m}_3}+2=\nu'_{\overline{m}_3}$ (ostali $\nu_m=\nu'_m$):

$$LS=\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_3}(\nu'_{\overline{m}_3}-1)}V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_3\overline{m}_3}. \tag{11.2.49d}$$

($\frac{1}{2}$ i dvojka iz $(V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_3\overline{m}_3}+V_{\overline{m}_2\overline{m}_1,\overline{m}_3\overline{m}_3})=2V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_3\overline{m}_3}$ se potiru).

e) $\nu_{\overline{m}_1}=\nu'_{\overline{m}_1}+2$, $\nu_{\overline{m}_2}+1=\nu'_{\overline{m}_2}$, $\nu_{\overline{m}_3}+1=\nu'_{\overline{m}_3}$ (ostali $\nu_m=\nu'_m$):

$$LS=\frac{1}{2}\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1}-1)\nu'_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_3}}(V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_3}+V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_3\overline{m}_2})$$

ili, usled simetričnosti matričnog elementa,

$$LS=\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1}-1)\nu'_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_3}}V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_3}. \tag{11.2.49e}$$

U poslednjoj klasi brojevi popunjenosti se razlikuju tačno *za četiri vrednosti* kvantnog broja: $\overline{m}_1,\overline{m}_2,\overline{m}_3$ i $\overline{m}_4$.

f) $\nu_{\overline{m}_1}=\nu'_{\overline{m}_1}+1$, $\nu_{\overline{m}_2}=\nu'_{\overline{m}_2}+1$, $\nu_{\overline{m}_3}+1=\nu'_{\overline{m}_3}$, $\nu_{\overline{m}_4}+1=\nu'_{\overline{m}_4}$: (ostali $\nu_m=\nu'_m$):

$$LS=\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_3}\nu'_{\overline{m}_4}}(V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_3\overline{m}_4}+V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_4\overline{m}_3}) \tag{11.2.49f}$$

(razlog za faktor 2 je isto kao pod b.).

B) Sad sledi izračunavanje matričnih elemenata našeg operatora dvočestičnog tipa $\hat{V}$ iz (11.2.22), koji se u pojedinim $\mathcal{V}_s^{(N)}$ (po definiciji) svodi na $\sum_{i<j}^N \hat{V}_{ij}$ za $N \geq 2$, a u $\mathcal{H}_1^{(u)}$ i u $[\mathcal{H}_1^{(u)}]^0$ na nulu. Znači za $N = 0, 1$, Teorem T 11.2.3 je već dokazan.

Bazisne vektore (11.2.4) pisaćemo u vidu $\mid m_1 m_2 ... m_N \rangle$, tj. koristićemo se jednobozonskim bazisom (11.2.5a). Pretpostavimo da u $\mid m_1 \rangle \mid m_2 \rangle ... \mid m_N \rangle$ iz (11.2.4) važi $m_1 \leq m_2 \leq ... \leq m_N$ (iz T 9.4.1 se vidi da to možemo). Onda u $\mathcal{V}_s^{(N\geq 2)}$ imamo:

$$LS \stackrel{\text{def}}{=} \langle m_1 m_2 ... m_N \mid \sum_{i<j}^{M} \hat{V}_{ij} \mid m_1' m_2' ... m_N' \rangle = \tag{11.2.50}$$

$$\frac{N!}{\sqrt{N_1! N_2! ...}\sqrt{N_1'! N_2'! ...}} \langle m_1 \mid \langle m_2 \mid ... \langle m_N \mid \sum_{i<j}^{N} \hat{V}_{ij} \hat{S} \mid m_1' \rangle \mid m_2' \rangle ... \mid m_N' \rangle$$

(učinili smo iste korake kao u delu B. prethodnog paragrafa). Pošto $\hat{V}_{ij} = \hat{P}(i<j)\hat{V}_{12}\hat{P}(i<j)^{-1}$ ($\hat{P}(i<j)$ dat je sa (10.1.53) , samo što je tamo obeležen sa $\hat{P}$), a $\hat{P}(i<j)^{-1}\hat{S} = \hat{S}$, kao što se lako vidi, imamo dalje (opet obeležavajući brojni faktor u (11.2.50) sa $N!C$):

$$LS = C \sum_{i<j}^{N} \sum_{p \in S_N} \langle m_i, m_j \mid \hat{V}_{12} \mid m_{p_1}', m_{p_2}' \rangle \langle\, m_{p(i<j)_3} \mid m_{p_3}' \rangle ... \langle\, m_{p(i<j)_N} \mid m_{p_N}' \rangle \tag{11.2.51}$$

(delovanje $\hat{P}(i<j)$ na levo na jeziku ketova znači delovanje $\hat{P}^\dagger(i<j) = \hat{P}^{-1}(i<j)$, stoga imamo u jednobozonskim braovima $m_{p(i<j)_i}$, a ne $m_{p(i<j)_i^{-1}}$; na kraju smo uzeli u obzir (10.1.53b), što daje $p(i<j)_1 = i$, $p(i<j)_2 = j$).

Nijedan od $(N-2)$ faktora na kraju od (11.2.51) neće biti nula samo ako bra $\langle m_1 ... m_N \mid$ i ket $\mid m_1' ... m_N' \rangle$ sadrže bar $(N-2)$ jednakih jednobozonskih stanja. Ograničimo se na ovakve bra i ketove (ni pod A. nismo imali opštiji slučaj da je davao $LS \neq 0$).

Posmatrajmo u (11.2.51) jedan sabirak u "$\sum_{i\leq j}^N$". Pođimo od permutacije $\overline{p}$ (zavisne od "$i \leq j$") koja je takva da $m_{p(i<j)_3} = m_{\overline{p}_3}', ..., m_{p(i<j)_N} = m_{\overline{p}_N}'$. Obeležimo sa prim permutacije koje u $\mid m_1' \rangle \mid m_2' \rangle ... \mid m_N' \rangle$ izazivaju samo permutovanje jednakih stanja. Očigledno da ove permutacije p čine podgrupu reda $N_1'! N_2'! ...$, a s druge strane sve permutacije vida $p'\overline{p}$ kao sabirci u "$\sum_{p\in S_N}$" daju isti sabirak. Opštija permutacija iz S_N daće nulu (zbog poslednjih $N-2$ faktora u (11.2.51)) osim ako su $m_{\overline{p}_1}' \neq m_{\overline{p}_2}'$, a p je transpozicija prvog i drugog bozona. Stoga

$$LS = \sqrt{\frac{N_1'! N_2'! ...}{N_1! N_2! ...}} \sum_{i<j}^{N} {\sum_p}' \langle m_i, m_j \mid \hat{V}_{12} \mid m_{\overline{p}_1}', m_{\overline{p}_2}' \rangle, \tag{11.2.52}$$

gde zbir "$\sum_p'$" sadrži samo jediničnu permutaciju ako $m_{\overline{p}_1}' = m_{\overline{p}_2}'$, a sadrži pored jedinične i pomenutu transpoziciju prvog i drugog bozona ako $m_{\overline{p}_1}' \neq m_{\overline{p}_2}'$.

a) *Dijagonalni* matrični elementi. Pošto je sad $N_1 = N_1'$ itd., prva dva faktora u (11.2.52) se potiru. "$\sum_{i<j}^N$" prelazi sve različite parove bozona u $\mid m_1 \rangle \mid m_2 \rangle ... \mid m_N \rangle$. Posmatrajmo posebno $m_i = m_j$. Obeležimo sa ν_m višestrukost stanja $\mid m \rangle$ u $\mid m_1 \rangle \mid m_2 \rangle ... \mid m_N \rangle$. Onda se $m_i = m_j$ za svaki m za koji $\nu_m \geq 2$ može postići na $\frac{\nu_m(\nu_m - 1)}{2}$ načina (broj različitih parova od ν_m objekata)

i toliko puta dobijamo matrični element $V_{mm,mm}$. Što se tiče $m_i \neq m_j$, to postižemo sabircima iz "$\sum_{i<j}^N$" za koje $m_i = m_1 \neq m_j = m_2$ i $\nu_{m_1} \geq 1, \nu_{m_2} \geq 1$. Zbog $m_1 \leq ... \leq m_N$ stoga sledi, uračunavajući i prethodni sabirak:

$$LS = \sum_{m;\nu_m \geq 2} \frac{\nu_m(\nu_m - 1)}{2} V_{mm,mm} + \sum_{m_1<m_2;\nu_{m_1}\geq 1,\nu_{m_2}\geq 1} \nu_{m_1}\nu_{m_2}(V_{m_1m_2,m_1,m_2} + V_{m_1m_2,m_2,m_1}) \tag{11.2.53a}$$

(poslednji sabirak potiče od permutacije u "$\sum_p'$" u (11.2.52) koja transponuje prvi i drugi bozon). Lako je videti da zbog simetričnosti operatora interakcije $\hat{V}_{12}$, imamo $V_{m_1m_2,m_1m_2} = V_{m_2m_1,m_2m_1}$ itd. Zahvaljujući tome zbir "$\sum_{m_1<m_2}$" iz (11.2.53a) i zbir "$\frac{1}{2}\sum_{m_1,m_2;m_1\neq m_2}$" iz (11.2.49$a$) su međusobno jednaki.

b) $\nu_{\overline{m}_1} - 1 = \nu'_{\overline{m}_1}$, $\nu'_{\overline{m}_2} - 1 = \nu_{\overline{m}_2}$ (ostali $\nu_m = \nu'_m$). Iz poslednjeg sledi da se svi faktorijeli u (11.2.52) skraćuju osim za $\overline{m}_1$ i $\overline{m}_2$, što ih svodi na: $\sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_1}!\nu'_{\overline{m}_2}\nu_{\overline{m}_2}!}{\nu_{\overline{m}_1}!\nu'_{\overline{m}_1}!\nu_{\overline{m}_2}!}} = \sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_2}}{\nu_{\overline{m}_1}}}$. Stoga sledi

$$LS = \sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_2}}{\nu_{\overline{m}_1}}}\{[\frac{1}{2}\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1} - 1)(V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_1} + V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_1\overline{m}_2})]+$$

$$[\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_2\overline{m}_2}] + [\nu_{\overline{m}_1} \sum_{m;\nu_m>0;m\neq\overline{m}_1,\overline{m}_2} \nu_m(V_{\overline{m}_1m,\overline{m}_2m} + V_{\overline{m}_1m,m\overline{m}_2})]\}$$

.

Naime, mogućnosti $m_i = m_j = \overline{m}_1$ doprinosi toliko sabiraka iz "$\sum_{i<j}^N$" u (11.2.52) koliko ima različitih parova čestica među $\nu_{\overline{m}_1}$ jednakih jednobozonskih stanja $|\,\overline{m}_1\,\rangle$ u $|\,m_1\,\rangle\,|\,m_2\,\rangle ...\,|\,m_N\,\rangle$.

Taj broj je $\frac{1}{2}\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1} - 1)$. Dva matrična elementa u prvoj srednjoj zagradi potiču od dva sabirka u "$\sum_p'$" u (11.2.52). Što se tiče druge srednje zagrade, uzimamo slučaj da je $m_i = \overline{m}_1$ i $m_j = \overline{m}_2$ i pretpostavljsmo da je $\overline{m}_1 < \overline{m}_2$. (Ako je $\overline{m}_2 < \overline{m}_1$ dobija se analogno $\nu_{\overline{m}_2}\nu_{\overline{m}_1}V_{\overline{m}_2\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_2}$, što je zbog simetričnosti matričnog elementa jednako izrazu u drugoj srednjoj zagradi.) Doprinose $\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}$ sabiraka iz "$\sum_{i<j}^N$," a "$\sum_p'$" sadrži samo jediničnu permutaciju. (Transpoziciju prve i druge čestice smo već uzeli u obzir među permutacijama jednakih stanja kada smo izveli (11.2.52).) Treću srednju zagradu dobijamo tako što uzimamo $m_i = \overline{m}_1$, $m_j = m \neq \overline{m}_1, \overline{m}_2$ i pretpostavljamo $\overline{m}_1 < m$ (za $m < \overline{m}_1$ dobijamo isto nakon korišćenja simetričnosti matričnih elemenata). Iz "$\sum_{i<j}^N$," doprinose $\nu_{\overline{m}_1}\nu_m$ članova, a "$\sum_p'$" sadrži pored jedinične permutacije i transpoziciju prve dve čestice.

Uzimanjem u obzir pretpostavke $\nu_{\overline{m}_1} - 1 = \nu'_{\overline{m}_1}$, $\nu'_{\overline{m}_2} - 1 = \nu_{\overline{m}_2}$ i $\nu_m = \nu'_m$ za ostale m, kao i simetričnost matričnih elemenata, gornju jednakost možemo da prepišemo u sledećem vidu:

$$LS = \sqrt{\nu_{\overline{m}_1}}\nu'_{\overline{m}_1}\sqrt{\nu'_{\overline{m}_2}}V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_1\overline{m}_2} + \sqrt{\nu_{\overline{m}_1}}\nu_{\overline{m}_2}\sqrt{\nu'_{\overline{m}_2}}V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_2\overline{m}_2}+ \tag{11.2.53b}$$

$$\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}\nu'_{\overline{m}_2}} \sum_{m;\nu_m\geq 1,m\neq\overline{m}_1,\overline{m}_2} \nu_m(V_{m\overline{m}_1,m\overline{m}_2} + V_{m\overline{m}_1,\overline{m}_2m}).$$

c) $\nu_{\overline{m}_1} = \nu'_{\overline{m}_1} + 2$, $\nu_{\overline{m}_2} + 2 = \nu'_{\overline{m}_2}$ (ostali $\nu_m = \nu'_m$). Stoga (11.2.52) daje

$$LS = \sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_1}\nu'_{\overline{m}_2}(\nu'_{\overline{m}_2} - 1)\nu_{\overline{m}_2}!...}{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1} - 1)\nu'_{\overline{m}_1}!\nu'_{\overline{m}_2}!...}} \sum_{i<j}^N \langle m_i = \overline{m}_1, m_j = \overline{m}_1 \mid \hat{V}_{12} \mid \overline{m}_2, \overline{m}_2 \rangle.$$

Kad skratimo što je jednako i uzmemo u obzir da u "$\sum_{i<j}^N$" doprinose onoliko sabiraka koliko ima različitih parova jednobozonskih stanja $\mid \overline{m}_1 \rangle$, dolazimo do $LS = \sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_2}(\nu'_{\overline{m}_2}-1)}{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1}-1)}} \frac{1}{2}\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1} - 1)V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_2}$, ili konačno

$$LS = \frac{1}{2}\sqrt{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1}-1)\nu'_{\overline{m}_2}(\nu'_{\overline{m}_2}-1)}V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_2}. \tag{11.2.53c}$$

d) $\nu_{\overline{m}_1} = \nu'_{\overline{m}_1} + 1$, $\nu_{\overline{m}_2} = \nu'_{\overline{m}_2} + 1$, $\nu_{\overline{m}_3} + 2 = \nu'_{\overline{m}_3}$, $\nu_m = \nu'_m$ za ostale m. Onda iz (11.2.52) sledi: $LS = \sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_1}!\nu'_{\overline{m}_2}!\nu'_{\overline{m}_3}(\nu'_{\overline{m}_3}-1)\nu_{\overline{m}_3}!\dots}{\nu_{\overline{m}_1}\nu'_{\overline{m}_1}!\nu_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_2}!\nu_{\overline{m}_3}!\dots}} \sum_{i<j}\langle m_i = \overline{m}_1, m_j = \overline{m}_2 \mid \hat{V}_{ij} \mid \overline{m}_3, \overline{m}_3 \rangle$ (pretpostavili smo $\overline{m}_1 < \overline{m}_2$, obratna pretpostavka bi dovela do istog zbog simetričnosti matričnog elementa). Dalje, $LS = \sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_3}(\nu'_{\overline{m}_3}-1)}{\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}}}\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_3\overline{m}_3}$, ili, najzad,

$$LS = \sqrt{\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_3}(\nu'_{\overline{m}_3}-1)}V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_3\overline{m}_3}. \tag{11.2.53d}$$

e) $\nu_{\overline{m}_1} = \nu'_{\overline{m}_1} + 2$, $\nu_{\overline{m}_2} + 1 = \nu'_{\overline{m}_2}$, $\nu_{\overline{m}_3} + 1 = \nu'_{\overline{m}_3}$ za ostale m $\nu_m = \nu'_m$. Jednakost (11.2.52) povlači, analogno kao u prethodnom slučaju,

$$LS = \sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_3}}{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1}-1)}}\sum_{i<j}\sum_p{}'\langle m_i = \overline{m}_1, m_j = \overline{m}_1 \mid \hat{V}_{12} \mid \overline{m}_2, \overline{m}_3 \rangle =$$

$$\sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_3}}{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1}-1)}}\frac{1}{2}\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1}-1)(V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_3} + V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_3\overline{m}_2}),$$

ili, najzad,

$$LS = \sqrt{\nu_{\overline{m}_1}(\nu_{\overline{m}_1}-1)\nu'_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_3}}V_{\overline{m}_1\overline{m}_1,\overline{m}_2\overline{m}_3}. \tag{11.2.53e}$$

f) $\nu_{\overline{m}_1} = \nu'_{\overline{m}_1} + 1$, $\nu_{\overline{m}_2} = \nu'_{\overline{m}_2} + 1$, $\nu_{\overline{m}_3} + 1 = \nu'_{\overline{m}_3}$, $\nu_{\overline{m}_4} + 1 = \nu'_{\overline{m}_4}$; za ostale m, $\nu_m = \nu'_m$. (11.2.52) onda ima za posledicu $LS = \sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_3}\nu'_{\overline{m}_4}}{\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}}}\sum_{i<j}\sum'_p\langle \overline{m}_1, \overline{m}_2 \mid \hat{V}_{12} \mid \overline{m}_3, \overline{m}_4 \rangle$ (pretpostavljamo $\overline{m}_1 < \overline{m}_2$). Dalje, $LS = \sqrt{\frac{\nu'_{\overline{m}_3}\nu'_{\overline{m}_4}}{\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}}}\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}(V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_3\overline{m}_4} + V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_4\overline{m}_3})$, što na kraju daje

$$LS = \sqrt{\nu_{\overline{m}_1}\nu_{\overline{m}_2}\nu'_{\overline{m}_3}\nu'_{\overline{m}_4}}(V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_3\overline{m}_4} + V_{\overline{m}_1\overline{m}_2,\overline{m}_4\overline{m}_3}). \tag{11.2.53f}$$

Usled podudaranja odgovarajućih jednakosti (11.2.49) i (11.2.53), Teorem T 11.2.3 je dokazan.

Glava 12

OSNOVNI POJMOVI TEORIJE RASEJANJA

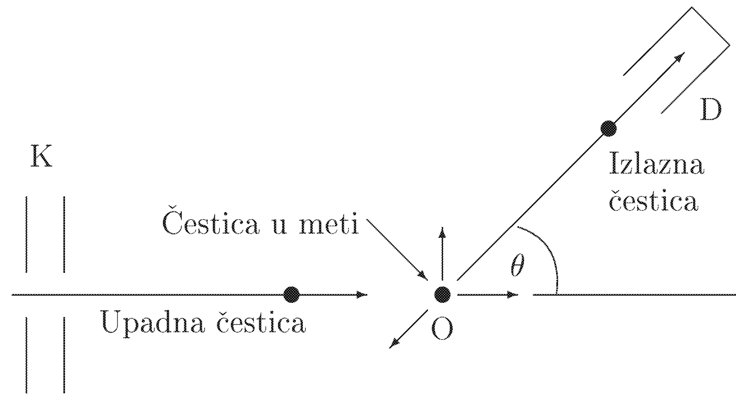
12.1 Osnovi teorije elastičnog rasejanja

Jedno od najvažnijih merenja u kvantnoj fizici sastoji se u rasejanju snopa čestica (ili fotona) na određenoj meti. Raspored rasejanih čestica po prostornim uglovima izražava se tzv. diferencijalnim presekom. U tzv. stanju rasejanja (to je u stvari stacionarno dvočestično stanje upadne čestice i čestice u meti) najvažniji entitet je tzv. amplituda rasejanja, koja se izvodi iz asimptotske forme rešenja zakona kretanja, a iz nje se neposredno izračunava diferencijalni presek. Izložićemo osnovne ideje dva najvažnija metoda računanja amplitude rasejanja: tzv. Born-ovu aproksimaciju i metod parcijalnih talasa. U prvom se radi o perturbacionom redu po malom potencijalu, a u drugom o redu po svojstvenim stanjima $\hat{\mathbf{l}}$. Prodiskutovaćemo i slučaj identičnih čestica.

12.1.1 Diferencijalni presek

Pretpostavimo da imamo jedan prostorni ansambl kvantnih sistema u stanju mirovanja u laboratorijskom koordinatnom sistemu. Takav ansambl naziva se *metom* (može se sastojati od molekula, ili od atoma, ili od jezgara, ili od elementarnih čestica). Osim toga, pretpostavimo da imamo *upadni snop* čestica ili fotona usmeren na metu. To je u stvari jedan prostorno-vremenski ansambl. Upadne čestice se sudaraju sa česticama u meti i nakon toga iste (ili druge čestice) se razleću po svim smerovima. Zamišljamo da je meta toliko mala da je sva u koordinatnom početku laboratorijskog sistema; z-osa da je u pravcu upadnog snopa; a smer izlazne čestice određujemo sfernim polarnim uglovima θ i φ kao na Crtežu C 12.1.

Početni uslov pored mete u stanju mirovanja u O na Crtežu C 12.1 obuhvata i upadni snop u kome čestice obično imaju približno oštru vrednost kinetičke energije, ali ne i oštru vrednost vektora impulsa. Naime, snop mora biti kolimiran (K je kolimator na Crtežu C 12.1) dovoljno usko da bi čestice pogađale metu i da ne bi mogle bez sudara da doprinose detekciji pod uglovima $\theta > 0$, φ. Doprinos upadnih čestica koje nisu pretrpele sudar uglu $\theta = 0$ se eksperimentalno ne može izbeći. Zato se ova vrednost gustine i ne dobija direktnim merenjem nego ekstrapolacijom iz merenih vrednosti za $\theta > 0$.



Slika 12.1: **Shema rasejanja.** *K je kolimator, O je meta (u koordinatnom početku), D detektor.*

Pod izloženim početnim uslovom u rasejanju se mere opservable $\hat{\theta}$ i $\hat{\varphi}$, zapravo gustina rasporeda izlaznih čestica po neprekidnim spektrima $[0, \pi]$ od $\hat{\theta}$ i $[0, 2\pi)$ od $\hat{\varphi}$ (eventualno istovremeno sa još nekim opservablama).

Važno je da se uoči da su snop i meta ansambli (a ne nadsistemi kao na primer što je meta monokristal u poznatom eksperimentu Davisson-a i Germer-a). Pojedine čestice snopa (u kome one po pretpostavci ne interaguju) sudaraju se sa pojedinim sistemima u meti i mi posmatramo posledice tih pojedinačnih sudara (ansambli, kao i obično, služe samo za intenzifikaciju efekata). Drugim rečima, pojedini sudari su nekoherentni. Za to je potrebno da je de Broglie-jeva talasna dužina upadnih čestica mala u poređenju sa rastojanjima među kvantnim sistemima u meti. Važno je i to da se upadne čestice ne sudaraju dva ili više puta sa sistemima u meti. Zato meta mora biti dovoljno tanka.

Upadna čestica je po pretpostavci mnogo lakša od sistema u meti. Nakon sudara i sistem mete pretrpi odbijanje[12.1.1], ali njegov doseg je mali i ovo odbijanje nije pogodno za merenje.

Pri sudaru upadne čestice sa kvantnim sistemom u meti najdrastičnije što može da se desi je zahvat čestice sa eventualnom naknadnom emisijom jedne ili više čestica (kao u nuklearnim reakcijama i u procesima elementarnih čestica; u zahvatu μ^- miona na upražnjenu elektronsku orbitu u atomskom omotaču itd.). Ovakav sudar ne spada u rasejanje. Pri *rasejanju* izlazna čestica (po definiciji) mora biti jednaka upadnoj čestici.

Pri sudaru u rasejanju kinetička energija izlazne čestice može biti različita od kinetičke energije upadne čestice. U ovakvom slučaju obično se deo kinetičke energije čestice prenosi na kvantni sistem u meti, koji prelazi u pobuđeno stanje. Ali moguće je i obratno, da je sistem bio u pobuđenom stanju, pa da se deekscitira prenosom (transferom) energije na rasejanu česticu. Ove vrste sudara sa razmenom energije nazivaju se *neelastičnim sudarima*. Saznaćemo nešto više o njima u sledećem odeljku.

Kaže se da se desio *elastičan sudar* kada se kinetička energija upadne čestice ne menja pri sudaru. Upoznavanju osnova teorije elastičnih sudara posvećen je ovaj odeljak.

Postavlja se pitanje kako ćemo precizno, kvantitativno izraziti pomenutu gustinu verovatnoće da se izlazna čestica detektuje pod uglovima θ, φ (s obzirom da se radi o fenomenu koji je proces, dešavanje, a ne samo trenutno merenje).

[12.1.1] Engleski: *recoil*, čitati: rikojl.

Obeležimo sa $\mathrm{d}n(\theta,\varphi)$ broj izlaznih čestica koje padaju u infinitezimalni prostorni ugao $\mathrm{d}\Omega$ oko uglova θ, φ u jedinici vremena, sa j fluks upadnog snopa (tj. broj čestica koje upadnu na jedinicu površine u xy ravni oko koordinatnog početka na Crtežu C 12.1 i to u jedinici vremena), a sa N broj kvantnih sistema (tzv. centara rasejanja) u meti. Onda

$$\boxed{\mathrm{d}n(\theta,\varphi) = jN\sigma_e(\theta,\varphi)\ \mathrm{d}\Omega}, \tag{12.1.1}$$

kao što neposredno sledi iz pretpostavke da se sudari dešavaju pojedinačno.

Faktor srazmernosti $\sigma_e(\theta,\varphi)$ jednak je $\frac{\mathrm{d}n(\theta,\varphi)}{\mathrm{d}\Omega}$, tj. prostornoj gustini fluksa izlaznih čestica oko θ, φ ako su ulazni fluks i broj sistema u meti jednaki jedinici: $j=1$, $N=1$. Veličina $\sigma_e(\theta,\varphi)$ naziva se *diferencijalni presek* (ili diferencijalni efikasni presek) elastičnog rasejanja[12.1.2]. Ova veličina zavisi od prirode kvantnog sistema u meti i upadne čestice.

U najvećem broju slučajeva interakcija ima sfernu simetriju, a eksperimentalni uređaj, pa prema tome i ceo problem samo aksijalnu (oko z-ose). U ovakvom slučaju pogodno je odmah preći na diferencijalni presek $\sigma_e(\theta)$:

$$\sigma_e(\theta) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi\, \sigma_e(\theta,\varphi) = 2\pi\sigma_e(\theta,\varphi_0), \quad \varphi_0 = 0. \tag{12.1.2}$$

Jasno, $\sigma_e(\theta)\sin\theta\ \mathrm{d}\theta$ je broj elastično rasejanih čestica (pri $j=1$, $N=1$) u infinitezimalni konični sloj oko θ.

Takozvani *totalni presek* elastičnog rasejanja σ_e je

$$\boxed{\sigma_e \stackrel{\mathrm{def}}{=} \int_0^{\pi} \sin\theta\ \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi\, \sigma_e(\theta,\varphi)}, \tag{12.1.3}$$

i iskazuje koliko se upadnih čestica ukupno rasejalo elastično (računato na jedinični upadni fluks i jedinični broj sistema).

Zadatak 12.1.1 Pokazati da preseci $\sigma_e(\theta,\varphi)$, $\sigma_e(\theta)$ i σ_e imaju dimenziju *površine* (prostorni ugao $\mathrm{d}\Omega$ je bezdimenzion, tj. dat u steradijanima)

.

U nuklearnoj fizici je uobičajena jedinica preseka tzv. *barn*, koji iznosi $10^{-24}\,\mathrm{cm}^2$.

12.1.2 *Koordinatni sistem centra masa i laboratorije

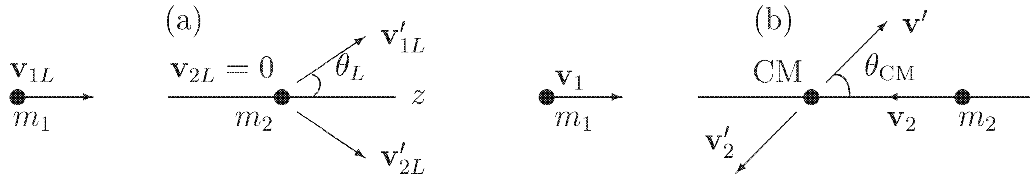
Ako su kvantni sistemi u meti mnogo teži od upadnih čestica, onda svaki od njih možemo smatrati beskonačno teškim centrom rasejanja. U ovoj aproksimaciji laboratorijski referentni sistem (skraćeno: L) je sasvim pogodan za proučavanje preseka elastičnog rasejanja. Onda se $\sigma_e(\theta,\varphi)$, $\sigma_e(\theta)$ i σ_e definišu u L sistemu.

Međutim, ako centar rasejanja nije mnogo teži od upadne čestice, onda pomenuta aproksimacija može biti loša. Pošto je sudar dvočestični fenomen, možemo sprovesti tačan postupak (tj. bez aproksimacije) ako pređemo na efektivne čestice (iz odeljka § 4.5). Do sudara dolazi usled uzajamne interakcije upadne čestice i sistema u meti, stoga efektivna čestica CM (centar masa ili težište) ne oseća sudar, već samo $R\check{C}$ (relativna čestica).

[12.1.2] Engleski: *differential cross section of elastic scattering*, čitati: diferenšl kros sekšn of ilestik sketering.

Ispostavlja se da je pogodnije umesto prelaska sa pravih čestica na efektivne preći na nov koordinatni sistem koji se zamišlja da je čvrsto vezan za težište, a i dalje posmatrati prave čestice. Izostavljajući indeks e (ionako u ovom odeljku proučavamo samo elastično rasejanje) onda imamo $\sigma_{\rm CM}(\theta,\varphi)$, $\sigma_{\rm CM}(\theta)$ i $\sigma_{\rm CM}$ pored $\sigma_L(\theta,\varphi)$, $\sigma_L(\theta)$ i σ_L. Postavlja se pitanje kako preći sa jednih na druge.

Prvo moramo videti kako su povezani uglovi $\theta_{\rm CM}$, $\varphi_{\rm CM}$ sa θ_L, φ_L. Pošto se težište kreće duž z-ose, $\varphi_L=\varphi_{\rm CM}$. Veza između $\theta_{\rm CM}$ i θ_L je složenija.



Slika 12.2: **Geometrija rasejanja.** *Prikazani su vektori brzina dve čestice pre i posle sudara (a) u laboratorijskom ($\mathbf{v}_{1L}$ i $\mathbf{v}_{2L}$, odnosno $\mathbf{v}'_{1L}$ i $\mathbf{v}'_{2L}$) i (b) sistemu centra masa.*

Ako sa $\mathbf{R}$ i $\mathbf{V}\stackrel{\rm def}{=}\frac{d\mathbf{R}}{dt}$ obeležimo radijus vektor i vektor brzine centra masa, onda za radijus vektore prve čestice u CM i L sistemu posle sudara imamo $\mathbf{r}'_1+\mathbf{R}=\mathbf{r}'_{1L}$, što daje

$$\mathbf{v}'_1+\mathbf{V}=\mathbf{v}'_{1L}. \tag{12.1.4}$$

Projektujući (12.1.4) na z-osu i na xy-ravan, sa Crteža C 12.2 dobijamo

$$v'_1\cos\theta_{\rm CM}+V=v'_{1L}\cos\theta_L,\quad v'_1\sin\theta_{\rm CM}=v'_{1L}\sin\theta_L, \tag{12.1.5a,b}$$

gde su v'_1 itd. intenziteti odgovarajućih brzina. Iskoristili smo i činjenicu da je $\mathbf{V}$ duž z-ose, naime $(m_1+m_2)\,\mathbf{R}=m_1\mathbf{r}_{1L}+m_2\mathbf{r}_{2L}$ i $\mathbf{v}_{2L}=0$ daju

$$\mathbf{V}=\mathbf{v}_{1L}\frac{m_1}{m_1+m_2}, \tag{12.1.6a}$$

a $\mathbf{z}_0\stackrel{\rm def}{=}\frac{\mathbf{v}_{1L}}{v_{1L}}$.

Vektorska jednakost (12.1.6a) povlači skalarnu

$$V=v_{1L}\frac{m_1}{m_1+m_2}. \tag{12.1.6b}$$

Zamenićemo (12.1.6b) u (12.1.5a) i zatim ćemo podeliti (12.1.5b) sa (12.1.5a):

$$\mathrm{tg}\,\theta_L=v'_1\sin\theta_{\rm CM}(v'_1\cos\theta_{\rm CM}+v_{1L}\frac{m_1}{m_1+m_2}). \tag{12.1.7}$$

Da bismo se u (12.1.7) oslobodili modula brzina, iskoristićemo održanje impulsa i kinetičke energije u CM sistemu.

Zadatak 12.1.2 Pokazati da je u CM sistemu ukupni impuls jednak nuli (i pre i posle sudara).

Lema 12.1.1 *Pri elastičnom sudaru se u sistemu centra masa ne menja intenzitet brzine ni prve ni druge čestice.*

Dokaz: Iz $m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2 = 0 = m_1\mathbf{v}_1' + m_2\mathbf{v}_2'$ sledi $\mathbf{v}_2 = -\frac{m_1}{m_2}\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2' = -\frac{m_1}{m_2}\mathbf{v}_1'$. Kad to zamenimo u $\frac{1}{2}m_1\mathbf{v}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\mathbf{v}_2^2 = \frac{1}{2}m_1\mathbf{v}_1'^2 + \frac{1}{2}m_2\mathbf{v}_2'^2$, sledi $\frac{1}{2}m_1\mathbf{v}_1^2 + \frac{1}{2}m_2(\frac{m_1}{m_2})^2\mathbf{v}_1^2 = \frac{1}{2}m_1\mathbf{v}_1'^2 + \frac{1}{2}m_2(\frac{m_1}{m_2})^2\mathbf{v}_1'^2$, tj. $v_1 = v_1'$. Simetričnim rezonovanjem sledi $v_2 = v_2'$. *Q. E. D.*

Lema L 12.1.1 korelira v_1' sa v_1. Radi uprošćenja (12.1.7) treba još da reliramo $\mathbf{v}_1$ sa $\mathbf{v}_{1L}$. Iz $\mathbf{r}_{1\,\mathrm{CM}} = \mathbf{r}_{1L} - \mathbf{R}$ sledi $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_{1L} - \mathbf{V}$, što uz pomoć (12.1.6$a$) dovodi do

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_{1L}\frac{m_2}{m_1+m_2}, \tag{12.1.8a}$$

ili, usled iskaza Leme L 12.1.1,

$$\mathbf{v}_1' = \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_{1L}\frac{m_2}{m_1+m_2}. \tag{12.1.8b}$$

Ako brojilac i imenilac na desnoj strani od (12.1.7) podelimo sa v_1' i iskoristimo (12.1.8b), onda konačno stižemo do rezultata:

$$\boxed{\mathrm{tg}\,\theta_L = \frac{\sin\theta_{\mathrm{CM}}}{\cos\theta_{\mathrm{CM}} + \frac{m_1}{m_2}}}. \tag{12.1.9}$$

U specijalnom slučaju jednakih masa $m_2 = m_1$, iz (12.1.9), korišćenjem poznate trigonometrijske relacije $\mathrm{tg}\,\frac{\alpha}{2} = \frac{\sin\alpha}{1+\cos\alpha}$, sledi

$$\theta_L = \frac{\theta_{\mathrm{CM}}}{2}. \tag{12.1.10}$$

Formula (12.1.10) sadrži očiglednu implikaciju da za $0 \le \theta_{\mathrm{CM}} \le \pi$, imamo $0 \le \theta_L \le \frac{\pi}{2}$. U laboratorijskom sistemu nema rasejanja pod tupim uglom θ_L.

Zadatak 12.1.3 a) Pokazati da u slučaju $m_1 > m_2$ imamo $\mathrm{tg}\,\theta_L \le \frac{1}{\frac{m_1}{m_2}-1}$, što znači da θ_L ne dostiže vrednost $\frac{\pi}{2}$, nego samo neki oštar ugao $\theta_L^{\max}$.

b) Pokazati da u slučaju $m_1 < m_2$ postoji jedan tupi ugao θ_{CM} takav da je odgovarajući θ_L jednak $\frac{\pi}{2}$; a kada $\theta_{\mathrm{CM}} \to \pi - 0$, odgovarajući $\theta_L \to \pi - 0$ takođe. Drugim rečima, imamo $0 \le \theta_{\mathrm{CM}} \le \pi$ i $0 \le \theta_L \le \pi$.

Sad možemo da se vratimo našem prvobitnom zadatku reliranja $\sigma_L(\theta,\varphi)$ i $\sigma_{\mathrm{CM}}(\theta,\varphi)$.

Pogledajmo u formuli (12.1.1) šta je invarijantno, a šta zavisi od koordinatnog sistema. Infinitezimalni prostorni ugao $\mathrm{d}\Omega$ je u stvari jedan te isti, samo je drugačija funkcija od θ_{CM}, φ_{CM}, a drugačija od θ_L, φ_L. Takođe je broj rasejanih čestica u $\mathrm{d}\Omega$ u jedinici vremena, $\mathrm{d}n$, jedan te isti u svim koordinatnim sistemima. Isto važi za N i j. Fluks j je invarijanta, jer je u stvari definisan u odnosu na metu (bez obzira iz kog referentnog sistema se posmatra sudar). Prema tome, (12.1.1) daje

$$\sigma_L(\theta_L,\varphi_L)\,\mathrm{d}\Omega_L = \sigma_{\mathrm{CM}}(\theta_{\mathrm{CM}},\varphi_{\mathrm{CM}})\,\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{CM}}. \tag{12.1.11}$$

Znači, problem se svodi na povezivanje $\mathrm{d}\Omega_L$ i $\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{CM}}$.

Lema 12.1.2 *Relacija (12.1.9) dovodi do sledeće veze:*

$$\mathrm{d}\Omega_L \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sin\theta_L\,\mathrm{d}\theta_L\,\mathrm{d}\varphi_L = \left(\frac{1+\frac{m_1}{m_2}\cos\theta_{\mathrm{CM}}}{1+2\frac{m_1}{m_2}\cos\theta_{\mathrm{CM}}+\frac{m_1^2}{m_2^2}}\right)^{\frac{3}{2}}\sin\theta_{\mathrm{CM}}\,\mathrm{d}\theta_{\mathrm{CM}}\,\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{CM}} = \left(\frac{1+\frac{m_1}{m_2}\cos\theta_{\mathrm{CM}}}{1+2\frac{m_1}{m_2}\cos\theta_{\mathrm{CM}}+\frac{m_1^2}{m_2^2}}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{CM}}. \tag{12.1.12}$$

Dokaz: Diferenciranje formule (12.1.9) daje $\frac{\mathrm{d}\theta_L}{\cos^2\theta_L} = \frac{1+\frac{m_1}{m_2}\cos\theta_{\rm CM}}{(\cos\theta_{\rm CM}+\frac{m_1}{m_2})^2}\,\mathrm{d}\theta_{\rm CM}$; s druge strane (12.1.9) se dâ rešiti po $\cos^2\theta_L$: $\cos^2\theta_L = \frac{(\cos\theta_{\rm CM}+\frac{m_1}{m_2})^2}{1+2\frac{m_1}{m_2}\cos\theta_{\rm CM}+(\frac{m_1}{m_2})^2}$ i po $\sin\theta_L = \frac{\sin\theta_{\rm CM}}{\sqrt{1+2\frac{m_1}{m_2}\cos\theta_{\rm CM}+(\frac{m_1}{m_2})^2}}$. Ove tri jednakosti i $\mathrm{d}\varphi_L = \mathrm{d}\varphi_{\rm CM}$, najzad, daju (12.1.12). *Q. E. D.*

Zamenom $\mathrm{d}\Omega_L$ iz (12.1.12) u (12.1.11) sledi konačni rezultat:

$$\boxed{\sigma_L(\theta_L,\varphi_L) = \frac{(1+2\frac{m_1}{m_2}\cos\theta_{\rm CM}+\frac{m_1^2}{m_2^2})^{\frac{3}{2}}}{1+\frac{m_1}{m_2}\cos\theta_{\rm CM}}\sigma_{\rm CM}(\theta_{\rm CM},\varphi_{\rm CM})} \tag{12.1.13}$$

Iz (12.1.2) se vidi da se i $\sigma_L(\theta)$ dobija kao proizvod iste funkcije u velikoj zagradi u (12.1.13) i $\sigma_{\rm CM}(\theta)$.

Zadatak 12.1.4 Iskoristiti (12.1.13) i Zadatak Z 12.1.3 i pokazati da za $m_1 < m_2$ važi:

$$\boxed{\sigma_L = \sigma_{\rm CM}}. \tag{12.1.14}$$

Dati fizičku interpretaciju ovog rezultata za totalni presek.

Napomenimo da (12.1.14) sledi i za preostala dva slučaja $m_1 = m_2$ i $m_1 > m_2$, samo onda moramo za $\theta_L > \frac{\pi}{2}$, odnosno za $\theta_L > \theta_L^{\rm max}$ (uporediti Zadatak Z 12.1.3a)) staviti $\sigma_L(\theta_L) \stackrel{\rm def}{=} 0$.

Zadatak 12.1.5 Ukupna kinetička energija dve čestice u laboratorijskom sistemu, $E_u(L)$, i u sistemu CM, $E_u(\mathrm{CM})$, nisu jednake. U odeljku § 4.5 smo videli da je u proizvoljnom koordinatnom sistemu ukupna kinetička energija dve čestice jednaka zbiru kinetičke energije relativne čestice, $E_{\rm R\check{C}}$, i kinetičke energije centra mase, $E_{\rm CM}$. Pokazati da je: a) $E_{\rm R\check{C}}$ ista u svakom referentnom sistemu; b) $E_u(\mathrm{CM}) = E_{\rm R\check{C}}$; c) $E_u(L) = E_u(\mathrm{CM}) = E_{\rm CM}(L)$.

12.1.3 Amplituda rasejanja

Odsad ćemo razmatrati samo presek u sistemu CM i nećemo to više isticati indeksom.

Postavlja se pitanje kako $\sigma(\theta,\varphi)$ relirati sa kvantno-mehaničkim zakonom kretanja. Pođimo od samog zakona kretanja i pronađimo njegov pogodan vid.

Lema 12.1.3 *Klasična Hamiltonova funkcija čestice mase m i potencijalne energije $V(\mathbf{r})$ može da se napiše u vidu*

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{l}^2}{2mr^2} + V(\mathbf{r}), \tag{12.1.15a}$$

gde je

$$p_r \stackrel{\rm def}{=} \frac{\mathbf{r}}{r}\cdot\mathbf{p} \tag{12.1.15b}$$

tzv. radijalna komponenta impulsa.

Dokaz: Uobičajeni vid dotične Hamiltonove funkcije glasi $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$. U svakoj tački prostora razlažemo $\mathbf{p}$ na radijalnu komponentu p_r, duž orta vektora $\mathbf{r}$, i na tangencijalnu komponentu $\mathbf{p}_t$, koja po definiciji, leži u ravni normalnoj na $\frac{\mathbf{r}}{r}$. Zbog ortogonalnosti $p_r\frac{\mathbf{r}}{r}$ i $\mathbf{p}_t$ imamo $\frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_t^2}{2m}$. A $\mathbf{p}_t^2 = (p\sin\alpha)^2 = (\frac{\mathbf{r}}{r}\times\mathbf{p})^2$, gde je $p \stackrel{\rm def}{=} |\mathbf{p}|$, $\alpha \stackrel{\rm def}{=} \angle(\mathbf{r},\mathbf{p})$. Stoga je $\mathbf{p}_t^2 = \frac{\mathbf{l}^2}{r^2}$ i dolazimo do (12.1.15a). *Q. E. D.*

Ako neposredno primenimo postupak kvantizacije na (12.1.15b), dobićemo operator $\hat{p}_r = \frac{\mathbf{r}}{r}\cdot\mathbf{p}$ u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$. Očigledno, $\hat{p}_r = -\imath\hbar\sum_{q=x,y,z}\cos\beta_q\frac{\partial}{\partial q} = -\imath\hbar\sum_q\frac{\partial q}{\partial r}\frac{\partial}{\partial q} = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial r}$, $\beta_q \stackrel{\rm def}{=} \angle(\mathbf{r},\mathbf{q}_0)$. Međutim, ovaj operator nije hermitski i moramo ga odbaciti.

Zadatak 12.1.6 Pokazati da $-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial r}$ nije hermitski operator u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$.

Analogno, ni kvantizacija varijable $\mathbf{p}\cdot\frac{\mathbf{r}}{r}$ ne dovodi do hermitskog operatora. Ali zato varijabla $\frac{1}{2}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\cdot\mathbf{p}+\mathbf{p}\cdot\frac{\mathbf{r}}{r}\right)$ daje kvantizacijom hermitski operator

$$\hat{p}_r \stackrel{\text{def}}{=} -\imath\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right). \tag{12.1.16}$$

Zadatak 12.1.7 Dokazati ovaj iskaz.

Kvantizacijom (12.1.15a) dobijamo sledeći vid hamiltonijana jedne čestice u $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2mr^2} + \hat{V}(\mathbf{r}). \tag{12.1.17}$$

Treba da ustanovimo relevantnost rezultata (12.1.17) za teoriju rasejanja. Ako radimo u apsoksimaciji beskonačno teških centara rasejanja (onda se CM sistem podudara sa L sistemom), neka se onda (12.1.17) odnosi na prvu česticu, a $V(\mathbf{r})$ neka potiče od druge čestice. Ako radimo egzaktno, neka se (12.1.17) odnosi na relativnu česticu u CM sistemu (i $m=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$).

Detektor koji meri $\mathrm{d}n(\theta,\varphi)$ (uporediti (12.1.1) i Crtež C 12.1) nalazi se u tzv. asimptotskom regionu, tj. toliko udaljen od mete (i koordinatnog početka) da se $V(\mathbf{r})$ više ne "oseća"[12.1.3], a i član $\frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2mr^2}$ se može zanemariti. Onda se (12.1.17) svodi na

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m}, \qquad r\to\infty. \tag{12.1.18}$$

Znači, treba naći rešenje svojstvenog problema operatora $\hat{p}_r$, koji deluje u radijalnom faktor prostoru $\mathcal{L}^2(r)$.

Uopšteni svojstveni vektori operatora $\hat{p}_r$ glase $\frac{e^{\imath kr}}{r}$, $-\infty<k<+\infty$.

Zadatak 12.1.8 Dokazati ovaj iskaz.

Vektor stanja $\frac{e^{\imath kr}}{r}$ se fizički interpretira kao izlazni sferni talas za $k>0$, a kao ulazni sferni talas za $k<0$ (ali to su sferni talasi samo u asimptotskom regionu, za razliku od sfernih talasa u celom prostoru koje smo proučavali u § 6.6.5).

Rasejanje je stacionaran proces. Opisuje ga stacionarno rešenje koje je svojstveni vektor hamiltonijana (12.1.17), tj. rešenje u vidu $\psi(r,\theta,\varphi)\,e^{-\frac{\imath}{\hbar}Et}$, gde je E energija relativne čestice. Talasna funkcija $\psi(r,\theta,\varphi)$, tzv. *stanje rasejanja*, mora da zadovoljava i sledeći *granični uslov*: u asimptotskom regionu mora da se ponaša na sledeći način:

$$\psi = e^{\imath\mathbf{kr}} + f(\theta,\varphi)\,\frac{e^{\imath kr}}{r}, \qquad r\to\infty, \tag{12.1.19}$$

[12.1.3]Da se $V(\mathbf{r})$ ne bi "osećao" u nekom udaljenom regionu neophodno je da opada brže nego $\frac{1}{r}$. Stoga se dalje rezonovanje u tekstu ne odnosi na slučaj Coulomb-ove interakcije. Rasejanje u Coulomb-ovom polju se proučava posebno. Videti, na primer *Teorijska fizika i struktura materije*, drugi deo, Ivan Supek, treće izdanje, Zagreb, 1964, glava VI, odeljci 9, 10 i 11.

gde je $k = |\mathbf{k}| = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Funkcija $f(\theta, \varphi)$ naziva se *amplitudom rasejanja.*

Prvi sabirak u (12.1.19) opisuje ulazni snop čestica, a drugi rasejani snop. Ukupno stanje je superpozicija[12.1.4,12.1.5].

Kao što smo rekli, detektor rasejanih čestica se nalazi u asimptotskom regionu, što znači da $\frac{\mathrm{d}n(\theta,\varphi)}{N}$, fluks u $\mathrm{d}\Omega$ od jednog centra rasejanja, možemo izračunati iz asimptotske forme (12.1.19) stanja rasejanja. Pri tome ulazni talas ne doprinosi ni direktno ni preko interference sa izlaznim sfernim talasom.

Kao što je poznato, u hidrodinamici se fluks tečnosti koja struji konstantnom brzinom $\mathbf{v} = v\mathbf{v}_0$, ($v \stackrel{\mathrm{def}}{=} |\mathbf{v}|$), kroz površinu normalnu na $\mathbf{v}_0$ izračunava kao količina tečnosti sadržana u cilindru čija je osnova jedinične površine a dužina jednaka v, dakle zapremine v. Po tom modelu se izračunava i svaki drugi fluks, pa i naš fluks verovatnoće izlazne čestice u tački $\mathbf{r}$ kroz površinu normalnu na $\mathbf{r}$. Izlazna čestica u $\mathbf{r}$ ima moduo impulsa $\hbar k$ (kao i upadna čestica), a brzinu[12.1.6] $\frac{\hbar k}{m}$. Gustina nalaženja izlazne čestice oko $\mathbf{r}$ je $|f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}|^2 = \frac{|f(\theta,\varphi)|^2}{r^2}$. Pretpostavljajući da je gustina konstantna u volumenu pomenutog cilindra, dobijamo verovatnoću nalaženja (i fluks verovatnoće) $v\frac{|f|^2}{r^2}$. Pošto infinitezimalnom prostornom uglu $\mathrm{d}\Omega$ odgovara ne jedinična površina, već $r^2\,\mathrm{d}\Omega$, imamo

$$\frac{\mathrm{d}n(\theta,\varphi)}{N} = (\frac{v|f|^2}{r^2})\, r^2\,\mathrm{d}\Omega = v|f(\theta,\varphi)|^2\,\mathrm{d}\Omega. \tag{12.1.20a}$$

S druge strane, definiciona jednakost preseka (12.1.1) daje

$$\frac{\mathrm{d}n(\theta,\varphi)}{N} = v\sigma(\theta,\varphi)\,\mathrm{d}\Omega, \tag{12.1.20b}$$

jer je gustina nalaženja ulazne čestice 1, a brzina opet $v = \frac{\hbar k}{m}$, te je $j = v$. Iz (12.1.20a) i (12.1.20b) sledi:

$$\boxed{\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2}. \tag{12.1.21}$$

Dakle, za teorijsko izračunavanje preseka dovoljno je izračunati amplitudu rasejanja, koja karakteriše stanje rasejanja u asimptotskom regionu.

Zadatak 12.1.9 Zašto norma stanja rasejanja ne utiče na rezultat (12.1.21) ?

[12.1.4] Otvor na kolimatoru na Crtežu C 12.1 je dovoljno velik da se ne opažaju difrakcioni efekti ulaznog snopa i da se sredina snopa može približno opisati ravnim talasom (videti sledeću fusnotu). S druge strane, isti otvor je dovoljno mali da u detektor uopšte ne dospevaju ulazne čestice koje nisu pretrpele sudar.

[12.1.5] Često se ulazni snop opisuje preciznije kao talasni paket, tj. stanje koje ima određenu distribuciju po vrednostima vektora impulsa oko $\mathbf{k} = k\mathbf{z}_0$. Videti, na primer, E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Second Edition, J. Wiley, N. Y., 1970, glava 11, paragraf 2.

[12.1.6] Detekcija izlazne čestice je jedno složeno selektivno merenje u kome se istovremeno ustanovljava da je čestica u asimptotskom regionu, da je u $\mathrm{d}\Omega$, a možda čak i da je $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$. Iz (12.1.19) je očigledno da je $\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{r^2}$. U asimptotskom regionu, zbog elastičnog rasejanja, $\hat{\mathbf{p}}^2 \approx \hat{p}_r^2 \approx \hbar^2 k^2$, gde je k talasni broj ulazne čestice. Detekcija, kao i svako merenje, svodi se na kraju na klasične varijable i zato sa modula impulsa $\hbar k$ možemo preći na klasičnu brzinu $v = \frac{\hbar k}{m}$.

12.1.4 *Integralna forma zakona kretanja pomoću Green-ove funkcije

U prethodnom paragrafu smo zaključili da $\sigma(\theta,\varphi)$ izračunavamo iz $f(\theta,\varphi)$, a $f(\theta,\varphi)$ iz asimptotske forme stanja rasejanja, tj. talasne funkcije $\psi(r,\theta,\varphi)$ relativne čestice koja je rešenje zakona kretanja

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})]\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{k^2\hbar^2}{2m}\psi(r,\theta,\varphi) \tag{12.1.22}$$

i graničnog uslova (12.1.19). Prostiji vid (12.1.22) glasi

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = U\psi, \qquad U(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r}). \tag{12.1.23a,b}$$

Naš je cilj u ovom paragrafu da (12.1.22)-(12.1.23) prevedemo u ekvivalentnu integralnu jednakost. U tu svrhu tretiramo $U\psi$ na desnoj strani od (12.1.23) kao dati član nehomogenosti i rešavamo (12.1.23) po ψ koje je na levoj strani. Za to nam je potreban operator koji je praktično inverzan u odnosu na $(\nabla^2 + k^2)$. To se rešava pomoću tzv. *Green-ovih*[12.1.7] *funkcija.* Kratko ćemo rezimirati relevantne činjenice iz matematike.

Matematički podsetnik Neka je $\hat{D}$ dati diferencijalni operator (linearna kombinacija diferencijalnih operatora raznih redova), a φ data funkcija. Treba rešiti nehomogenu diferencijalnu jednačinu

$$\hat{D}\psi = \varphi \tag{12.1.24}$$

po ψ. Tražimo rešenje sa asimptotskom formom (12.1.19).

Prvo se rešava pomoćna jednačina

$$\hat{D}G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{12.1.25}$$

Rešenje $G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ se naziva *Green-ovom funkcijom.* Pomoću nje se dobija partikularno rešenje od (12.1.24):

$$\psi_p(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\varphi(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}\mathbf{r}'. \tag{12.1.26}$$

Zadatak 12.1.10 Dokazati ovaj iskaz. (Indikacija: Delovati sa $(\nabla^2 + k^2)$ na (12.1.26) i iskoristiti (12.1.25).)

Green-ovu funkciju treba odabrati tako da $\psi_p(\mathbf{r})$ iz (12.1.26) ima željenu asimptotsku formu.

U našem slučaju imamo $\hat{D} = \nabla^2 + k^2$, a $\varphi = U\psi$, tj. (12.1.24) je u stvari (12.1.23). Ispostavlja se da Green-ova funkcija koja rešava ovaj problem glasi[12.1.8]:

$$G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\frac{e^{\imath k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{12.1.27}$$

[12.1.7] Čitati: Grinovih.

[12.1.8] Dokaz da je sa (12.1.27) data Green-ova funkcija kao i da $\psi(\mathbf{r})$ iz (12.1.28) ima traženu asimptotsku formu nije težak. Može se naći, na primer, u udžbeniku *Teorijska fizika i struktura materije*, drugi deo, Ivan Supek, treće izdanje, Zagreb, 1964, glava VI, odeljak 2.

Tako da iz (12.1.26) sledi integralna jednakost za talasnu funkciju rasejanja ψ:

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = e^{\imath\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \int \frac{e^{\imath k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}\mathbf{r}.} \tag{12.1.28}$$

U stvari, partikularno rešenje ψ_p iz (12.1.26) je drugi sabirak, cela desna strana se dobija iz opšteg rešenja (to je partikularno rešenje plus opšte rešenje homogene jednačine) tako da se zadovolji granični uslov (12.1.19).

12.1.5 *Born-ova aproksimacija

Pretpostavimo da je polje $V(\mathbf{r})$ slabo, tj. da je $U(\mathbf{r}') = \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r}')$ u (12.1.28) malo. Onda se (12.1.28) može uspešno rešavati *iteracionom metodom.* U prvoj iteraciji na desnoj strani od (12.1.28) zamenjujemo $\psi(\mathbf{r}')$ sa $e^{\imath\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}$ i tako dobijamo

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{\imath\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{\imath k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\,e^{\imath\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}\,\mathrm{d}\mathbf{r}'. \tag{12.1.29}$$

Da bismo izračunali amplitudu rasejanja, moramo preći na *asimptotski vid od* ψ. Pretpostavićemo da je $V(\mathbf{r}')$ u (12.1.29) kratkog dosega, tj. da postaje zanemarljivo malo za veće $r' \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{r}'|$. Stoga $\frac{r'}{r}$, gde je $r \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{r}|$, možemo smatrati malom veličinom u asimptotskom regionu, tj. za $r \gg 1$. Razvićemo $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ i posebno $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$ u red po $\frac{r'}{r}$ zaključno sa članom prvog reda po malosti.

Poslužićemo se formulama[12.1.9]:

$$S = a + bx + cx^2,\quad 0 < x \ll 1,\quad \sqrt{S} = \sqrt{a}(1 + \frac{b}{2a}x + \mathrm{O}(x^2)),\quad \frac{1}{\sqrt{S}} = \frac{1}{\sqrt{a}}(1 - \frac{b}{2a}x + \mathrm{O}(x^2)). \tag{12.1.30}$$

U našem slučaju $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}' + \mathbf{r}'^2} = r\sqrt{S}$, odnosno $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1} = \frac{1}{r\sqrt{S}}$ ($\mathbf{r}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{r}}{r}$, $\mathbf{r}_0' \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{r}'}{r'}$). Prema tome,

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r(1 - \mathbf{r}_0\cdot\mathbf{r}_0'\frac{r'}{r}),\qquad |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1} \approx \frac{1}{r}(1 + \mathbf{r}_0\cdot\mathbf{r}_0'\frac{r'}{r}). \tag{12.1.31}$$

U drugoj relaciji u (12.1.31) možemo zanemariti drugi sabirak. Onda (12.1.31) daju:

$$\frac{e^{\imath k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \approx e^{-\imath k\mathbf{r}_0\cdot\mathbf{r}'}\frac{e^{\imath kr}}{r}. \tag{12.1.32}$$

Tako se (12.1.29) u asimptotskom regionu svodi na

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{\imath\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + (-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{\imath k(\mathbf{z}_0-\mathbf{r}_0)\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}\mathbf{r}')\frac{e^{\imath kr}}{r},\quad r\to\infty, \tag{12.1.33}$$

[12.1.9] Бронштајн, Семендјајев, *Справочник по математике.* Гос. Изд. физ. мат. лит., Москва 1955, str. 300-1.

jer $\mathbf{k} = k\mathbf{z}_0$, gde je $\mathbf{z}_0$ ort z ose.

Iz (12.1.33) proizlazi da je amplituda rasejanja

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{\imath k(\mathbf{z}_0-\mathbf{r}_0)\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}\mathbf{r}'. \tag{12.1.34}$$

Ovde su θ i φ sferni polarni uglovi od $\mathbf{r}_0$ (tj. od orta od $\mathbf{r}$). Najzad, iz (12.1.21) sledi da *diferencijalni presek u Born-ovoj aproksimaciji*, kako se naziva izvedeni rezultat prve iteracije, glasi

$$\boxed{\sigma(\theta,\varphi) = \tfrac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int e^{\imath k(\mathbf{z}_0-\mathbf{r}_0)\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}\mathbf{r}'\right|^2}. \tag{12.1.35}$$

Formula (12.1.35) je dobijena iz prve iteracije. Često se kaže da je to *prva* Born-ova aproksimacija. Po potrebi može da se izračuna druga iteracija zamenjujući (12.1.29) na desnoj strani od (12.1.28). Tako se dobija druga Born-ova aproksimacija, itd.

Uvedimo novu z' osu u smeru vektora $(\mathbf{z}_0 - \mathbf{r}_0)$ sa proizvoljno fiksiranim novim x' i y' osama. Neka su r', θ' i φ' sferne polarne koordinate od $\mathbf{r}'$ u odnosu na novi koordinatni sistem. Relacija (12.1.35) se u *centralno simetričnom polju* $V(\mathbf{r}')$ onda prepisuje u vidu

$$\boxed{\sigma(\theta,\varphi) = \tfrac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int e^{\imath 2k\sin(\frac{\theta}{2})r'\cos\theta'}V(r')r'^2\,\mathrm{d}r'\sin\theta'\,\mathrm{d}\theta'\,\mathrm{d}\varphi'\right|^2}, \tag{12.1.36}$$

gde je, naravno, i dalje $\theta \stackrel{\mathrm{def}}{=} \angle(\mathbf{z}_0, \mathbf{r}_0)$.

Zadatak 12.1.11 Dokazati ovaj iskaz.

Zadatak 12.1.12 Električno polje koje potiče od neutralnog atoma rednog broja Z izražava se tzv. ekraniranim Coulomb-ovim poljem

$$V(r) = \frac{Zee_1}{r}e^{-\frac{r}{a}}, \tag{12.1.37}$$

gde je e naboj protona, e_1 naboj rasejane čestice, a a je približno radijus atoma. Pokazati da se za slučaj $2ka\sin\frac{\theta}{2} \gg 1$ dobija

$$\boxed{\sigma(\theta) = \tfrac{Z^2e^2e_1^2}{16E^2\sin^4\frac{\theta}{2}}}, \tag{12.1.38}$$

gde je $E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$ energija rasejane relativne čestice.

Relacija (12.1.38) je tzv. *Rutherford-ova formula*[12.1.10]. Ona se izvodi i u klasičnoj fizici. Može se pokazati da u nerelativističkoj kvantnoj mehanici Rutherford-ova formula u stvari važi egzaktno, a ne samo u prvoj Born-ovoj aproksimaciji kako smo je mi dobili.

Da se vratimo na opšti slučaj Born-ove aproksimacije. Ona je korisna ako dotično iteriranje brzo konvergira (ka samousaglašenom rešenju), te prva iteracija već sadrži dominantni doprinos. Ali to nije uvek slučaj[12.1.11].

[12.1.10] Čitati: Raderfordova.

[12.1.11] Kriterijumi za primenljivost Born-ove aproksimacije, kao i kriterijumi za primenljivost klasičnog prilaza (ili pak za nužnost kvantnog prilaza) dati su dosta iscrpno u: D. Bohm, *Quantum Theory*, Prentice-Hall Inc., N. Y., 1952 (ili u ruskom prevodu od 1965 g.) u glavi 21.

12.1.6 *Metod parcijalnih talasa

Videli smo da se zakon kretanja za rasejanu relativnu česticu može izraziti u integralnom vidu i da se on prirodno rešava metodom iteracija, koje daju pojedine Born-ove aproksimacije. Sada ćemo izložiti jedan drugi metod, koji je takoreći komplementaran pomenutom, a nosi naziv iz naslova paragrafa. Ovaj metod je naročito pogodan u slučaju niske energije i velikog potencijala kratkog dometa, kao što je nuklearni potencijal. Tu Born-ova aproksimacija uopšte nije pogodna.

Vratimo se na diferencijalni vid zakona kretanja (12.1.22):

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})]\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(r,\theta,\varphi).$$

Ograničićemo se na *sferno simetrični potencijal*: $V(\mathbf{r}) = V(r)$.

Rešavaćemo ovu jednakost metodom separacije varijabli kao što smo činili u ranijim glavama. U faktor prostoru $\mathcal{L}^2(\Omega)$ dobijamo sferne harmonike $Y_l^m(\theta,\varphi)$, a u radijalnom faktor prostoru $\mathcal{L}^2(r)$ preostaje

$$[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}) + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2} + V(r)]\,u_l(r) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}u_l(r)$$

(uporediti (6.6.17)).

Množeći dobijenu jednakost sa $-\frac{2m}{\hbar^2}$ i koristeći se jednakošću (koja se lako proverava):

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}) = \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} = \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r,$$

odmah sledi:

$$[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2]\,u_l(r) = 0, \qquad (12.1.39)$$

gde je $U(r) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2m}{\hbar^2}V(r)$ kao i ranije, u (12.1.23).

Traženo rešenje $u_l(r)$, iako uopšteni vektor, mora biti u domenu hamiltonijana. Stoga $u_l(r)$ mora biti konačna i diferencijabilna funkcija u $[0,\infty)$. Dakle, u $r=0$, $u_l(r)$ mora biti regularna funkcija.

Intuitivno je očigledno da je naš problem rasejanja aksijalno simetričan oko z ose, te da se možemo ograničiti na aksijalno simetrična rešenja. A to će biti rešenja koja ne zavise od φ, tj. za koja je magnetni kvantni broj $m=0$. Rezonujući strogo kvantno-mehanički, prvo bismo konstatovali da naš početni uslov, tj. upadni ravni talas ima $m=0$.

Zadatak 12.1.13 Dokazati ovaj iskaz.

Pošto hamiltonijan komutira sa $\hat{l}_z$, i celo stanje rasejanja će imati $m=0$.

Iako hamiltonijan komutira i sa $\hat{\mathbf{l}}^2$, početni uslov nema određeno l, te stanje rasejanja moramo da razvijemo po l:

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l u_l(r) Y_l^{m=0}(\theta).$$

Funkcija $Y_l^{m=0}$ je jednaka, s tačnošću do konstante, Legendre-ovom polinomu $P_l(\cos\theta)$ (uporediti (6.6.7) i (6.6.5a)). Stoga poslednja jednakost može da glasi:

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} b_l u_l(r) P_l(\cos\theta). \tag{12.1.40}$$

Kao što smo videli, nama je u stvari potrebna samo asimptotska forma od $\psi(r,\theta)$. Izračunaćemo asimptotsku formu pojedinih $u_l(r)$.

U asimptotskom regionu (12.1.39) se svodi na

$$(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r + k^2)\, u_l(r) = 0, \qquad r \to \infty. \tag{12.1.41}$$

Opšte rešenje od (12.1.41) glasi $\frac{\alpha}{r}\cos kr + \frac{\beta}{r}\sin kr$ ili, ekvivalentno, $\frac{\gamma}{r}\sin(kr+\delta)$, kao što je lako videti. Ispostavlja se da je pogodno staviti $\delta \stackrel{\text{def}}{=} -l\frac{\pi}{2} + \delta_l$, $\gamma \stackrel{\text{def}}{=} \frac{e^{\imath\delta_l}}{k}$. Tako u stvari svodimo dve nepoznate konstante na jednu (na δ_l), ali kad

$$u_l(r) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{e^{\imath\delta_l}}{kr}\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l), \qquad r \to \infty \tag{12.1.42}$$

zamenimo u (12.1.40), u stvari smo drugu nepoznatu konstantu apsorbovali u nepoznatu konstantu b_l (i pretvorili je, recimo, u c_l).

Potrebno nam je i razvijanje ravnog talasa po sfernim talasima:

$$e^{\imath kz} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, \imath^l\, j_l(kr) P_l(\cos\theta), \tag{12.1.43}$$

gde je $j_l(kr)$ sferna Bessel-ova funkcija (uporediti § 6.6.5). Asimptotska forma od $j_l(kr)$ glasi[12.1.12]: $\frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}$.

Sad možemo asimptotsku formu od $\psi(r,\theta)$ izjednačiti sa asimptotskom formom $e^{\imath kz} + f(\theta)\frac{e^{\imath kr}}{r}$ koju znamo od početka ovog odeljka:

$$\sum_{l=0}^{\infty} c_l \frac{e^{\imath\delta_l}}{kr}\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l) P_l(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, \imath^l\, \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} P_l(\cos\theta) + f(\theta)\frac{e^{\imath kr}}{r}. \tag{12.1.44}$$

Izražavajući sinuse preko eksponencijalnih funkcija i izjednačavajući koeficijente pored $\frac{e^{-\imath kr}}{r}$ na levoj strani i na desnoj strani (jer $\frac{e^{-\imath kr}}{r}$ i $\frac{e^{\imath kr}}{r}$ su linearno nezavisne funkcije u $\mathcal{U}(\mathcal{L}^2(r))$, sledi:

$$\sum_l c_l \frac{e^{\imath\delta_l}}{k}\, \frac{\imath}{2}\, e^{\imath l\frac{\pi}{2}}\, e^{-\imath\delta_l}\, P_l(\cos\theta) = \sum_l (2l+1)\, \imath^l\, \frac{\imath}{2k}\, e^{\imath l\frac{\pi}{2}}\, P_l(\cos\theta).$$

Pošto su Legendre-ovi polinomi ortogonalni (stoga linearno nezavisni elementi od $\mathcal{L}^2(\theta)$), dolazimo najzad do rezultata

$$c_l = (2l+1)\, \imath^l. \tag{12.1.45}$$

[12.1.12] Razvijanje (12.1.43) izvodi se u "Matematičkoj dopuni", na str. 602-3 u udžbeniku *Teorijska fizika i struktura materije*, Ivan Supek, treće izdanje, Zagreb, 1964. A asimptotska forma od $j_l(kr)$ izvedena je u istoj knjizi na str. 600.

S druge strane, izjednačavajući koeficijente pored $\frac{e^{\imath kr}}{r}$ na levoj strani i na desnoj strani od (12.1.44) sledi:

$$\sum_l c_l \frac{e^{\imath\delta_l}}{k} \frac{1}{2\imath} e^{-\imath l\frac{\pi}{2}} e^{\imath\delta_l} P_l(\cos\theta) = \sum_l (2l+1)\, \imath^l \frac{1}{2k\imath} e^{-\imath l\frac{\pi}{2}} P_l(\cos\theta) + f(\theta).$$

Na osnovu $\imath = e^{\imath\frac{\pi}{2}}$ i (12.1.45) onda dobijamo

$$f(\theta) = \frac{1}{2k\imath} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2\imath\delta_l} - 1)\, P_l(\cos\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, e^{\imath\delta_l} \sin\delta_l\, P_l(\cos\theta). \qquad (12.1.46)$$

Prema tome, pošto je $\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2$, a $\sigma(\theta) = 2\pi\sigma(\theta,\varphi)$ ako $\sigma(\theta,\varphi)$ ne zavisi od φ, imamo

$$\boxed{\sigma(\theta) = \frac{2\pi}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, e^{\imath\delta_l} \sin\delta_l\, P_l(\cos\theta) \right|^2}. \qquad (12.1.47)$$

Znači, u diferencijalnom preseku sferni talasi sa različitim određenim vrednostima l *interferiraju*. To potiče otud što je merenje određenog l (tj. opservable $\hat{\mathbf{l}}^2$) nekompatibilno sa merenjem prostornog ugla $\Omega = \theta$, φ (ili samog ugla θ) i obratno.

Pošto su Legendre-ovi polinomi ortogonalni

$$\int_0^{\pi} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta \; \mathrm{d}\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}, \qquad (12.1.48)$$

totalni presek, definisan sa $\sigma \overset{\text{def}}{=} \int_0^{\pi} \sin\theta\sigma(\theta)\; \mathrm{d}\theta$, je dat sa:

$$\boxed{\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l}. \qquad (12.1.49)$$

Kao što se i moglo očekivati, u totalnom preseku, u kome više nije implikovano merenje ugla, nema više ni interference.

Često se definiše *parcijalni presek*:

$$\sigma_l \overset{\text{def}}{=} \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2\delta_l, \qquad (12.1.50)$$

onda je

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l. \qquad (12.1.51)$$

Očigledno,

$$\sigma_l \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1). \qquad (12.1.52)$$

Dakle, u parcijalnom preseku σ_l imamo samo tzv. *fazni pomak* δ_l kao otvoren (tj. nepoznat) realan broj. Čitavo dejstvo potencijala rasejanja $V(r)$ ispoljava se u faznim pomacima.

12.1.7 *Optički teorem

Iz rezultata metoda parcijalnih talasa neposredno sledi jedan važan teorem koji nosi naziv iz naslova paragrafa.

Teorem 12.1.1 *Totalni presek elastičnog rasejanja zavisi samo od amplitude rasejanja za ugao $\theta = 0$ i to preko proste funkcionalne veze:*

$$\boxed{\sigma = \tfrac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\, f(\theta = 0)}. \tag{12.1.53}$$

Dokaz: Pošto je $P_l(\cos\theta) = 1$, iz (12.1.46) odmah sledi $\mathrm{Im}\, f(0) \overset{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2\imath}(f(0) - f^*(0)) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l$, a to je na osnovu (12.1.49) jednako $\frac{k\sigma}{4\pi}$. *Q. E. D.*

12.1.8 *Efekti izmene identičnih čestica bez spina

U ovom odeljku smo do sada proučavali samo različive čestice. Pretpostavljali smo (prećutno) da pri merenju broja čestica koje se rasejavaju u infinitezimalni prostorni ugao oko $\Omega = \theta, \varphi$ umemo da razlikujemo upadne čestice od čestica u meti. U ovom paragrafu ćemo pretpostaviti da su upadna čestica i čestica u meti identične čestice bez spina (tj. sa spinom $s = 0$). Onda je pri dotičnom merenju principijelno nemoguće razlikovati da li merimo rasejanu upadnu česticu ili rasejanu (tj. odbijenu) česticu iz mete.

Pošto se radi o bozonskom dvočestičnom sistemu, stanje rasejanja mora biti *simetričan* vektor. Operator izmene $\hat{E}$ uzajamno izmenjuje $\mathbf{r}_1$ i $\mathbf{r}_2$ u $\mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \mathcal{H}_2^{(u)}$, a u faktor prostoru $\mathcal{H}_{\mathrm{RČ}}^{(u)}$ iz $\mathcal{H}_{\mathrm{RČ}}^{(u)} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{CM}}^{(u)} = \mathcal{H}_1^{(u)} \otimes \mathcal{H}_2^{(u)}$ deluje kao operator prostorne inverzije $\hat{\mathcal{I}}_{\mathrm{RČ}}^{(p)}$, tj. prevodi $\mathbf{r}$ u $-\mathbf{r}$ (uporediti 9.3.10). Stoga talasna funkcija relativne čestice mora biti nepromenjena pod dejstvom $\hat{\mathcal{I}}_{\mathrm{RČ}}^{(p)}$.

Asimptotsko stanje rasejanja, prema tome, glasi

$$e^{\imath kz} + e^{-\imath kz} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{\imath kr}}{r} + f(\pi-\theta,\varphi\pm\pi)\frac{e^{\imath kr}}{r} \tag{12.1.54}$$

("+" za $0 \le \varphi \le \pi$), a diferencijalni presek je dat sa

$$\boxed{\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi) + f(\pi-\theta,\varphi\pm\pi)|^2}. \tag{12.1.55}$$

Sabirci u (12.1.55) se odnose na upadnu i na česticu iz mete. Njihova nerazličivost se ogleda u *interferenciji* dva sabirka. Naime, kada bi čestice bile različive, a mi ih našom odlukom ne bi razlikovali pri merenju, onda bismo umesto (12.1.55) imali: $\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2 + |f(\pi-\theta,\varphi\pm\pi)|^2$. Razlika između (12.1.55) i ovog izraza pripisuje se *efektu izmene*.

12.1.9 *Efekti izmene identičnih čestica sa spinom

Pretpostavimo sad da imamo dva identična fermiona sa spinom $s = \frac{1}{2}$. Onda dvočestično spinsko stanje može biti singletno ($S = 0$) ili tripletno ($S = 1$). U prvom slučaju prostorno dvočestično stanje mora biti simetrično (jer spinsko je antisimetrično, uporediti § 9.5), a u drugom antisimetrično (jer spinsko je simetrično).

Obeležavajući indeksom s i t singletno, odnosno tripletno stanje, imamo

$$\psi_s(r,\theta,\varphi) = e^{\imath kz} + e^{-\imath kz} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{\imath kr}}{r} + f(\pi-\theta,\varphi\pm\pi)\frac{e^{\imath kr}}{r}, \qquad r\to\infty, \tag{12.1.56a}$$

$$\psi_t(r,\theta,\varphi) = e^{\imath kz} - e^{-\imath kz} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{\imath kr}}{r} - f(\pi-\theta,\varphi\pm\pi)\frac{e^{\imath kr}}{r}, \qquad r\to\infty. \tag{12.1.56b}$$

Što se tiče presekâ, oni su dati obrascima:

$$\boxed{\sigma_s(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi) + f(\pi-\theta,\varphi\pm\pi)|^2}, \tag{12.1.57a}$$

$$\boxed{\sigma_t(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi) - f(\pi-\theta,\varphi\pm\pi)|^2}. \tag{12.1.57b}$$

Očigledno, opet imamo efekt izmene u oba slučaja.

Obično su čestice pri rasejanju *nepolarizovane*, pa se piše

$$\boxed{\sigma(\theta,\varphi) = \tfrac{1}{4}\sigma_s(\theta,\varphi) + \tfrac{3}{4}\sigma_t(\theta,\varphi)}. \tag{12.1.58}$$

Zadatak 12.1.14 Nepolarizovano stanje znači da je u faktor prostoru $\mathcal{H}_1^{(s)} \otimes \mathcal{H}_2^{(s)}$ stanje mešano opisano sa $\hat\rho = \frac{1}{4}\hat I$ (a u $\mathcal{H}_1^{(o)} \otimes \mathcal{H}_2^{(o)}$ stanje je čisto). Izvesti (12.1.58).

Zadatak 12.1.15 Uzmimo opšti slučaj identičnih čestica spina s (ceo ili poluceo).

a) Pokazati da relativna čestica mora biti u svojstvenom stanju od $\hat{\mathcal{I}}^{(p)}_{\text{RČ}}$ koje odgovara svojstvenoj vrednosti

$$\Pi_{\text{RČ}} = -(-1)^{2s-S}, \tag{12.1.59a}$$

gde je S dvočestični spin.

b) Pokazati da odgovarajući diferencijalni presek $\sigma_{\Pi_{\text{RČ}}}$ glasi

$$\sigma_{\Pi_{\text{RČ}}}(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi) + \Pi_{\text{RČ}} f(\pi-\theta,\varphi\pm\pi)|^2 \tag{12.1.59b}$$

(svi su σ_s sa istim $\Pi_{\text{RČ}}$ jednaki $\sigma_{\Pi_{\text{RČ}}}$).

c) Pokazati da je diferencijalni presek u slučaju nepolarisanog stanja dat obrascem

$$\sigma(\theta,\varphi) = \sum_{\Pi_{\text{RČ}}=\pm1} W_{\Pi_{\text{RČ}}}\,\sigma_{\Pi_{\text{RČ}}}(\theta,\varphi), \tag{12.1.59c}$$

gde je

$$W_{\Pi_{\text{RČ}}} = \frac{s+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\Pi_{\text{RČ}}}{2s+1}. \tag{12.1.59d}$$

12.2 Osnovni pojmovi opšte teorije sudara

Ovaj kratak odeljak ima dvostruku svrhu:

(a) da dopuni detaljniju teoriju potencijalnog elastičnog rasejanja iz prethodnog odeljka nabačenim osnovnim pojmovima rezonantnog elastičnog rasejanja i neelastičnog rasejanja i

(b) da potencijalno rasejanje stavi u pravu kvantno-mehaničku perspektivu, što je za zasnivanje teorije rasejanja u kvantnoj mehanici možda isto toliko važno koliko i detaljno poznavanje osnovnih formula.

Efekte koji su u vezi sa spinom nećemo uopšte diskutovati, kao ni efekte izmene usled eventualne identičnosti upadne čestice sa jednom ili više čestica koje ulaze u sastav kvantnog sistema u meti.

12.2.1 Kakvi su sve sudari mogući

U teoriji sudara čine se sledeća ograničenja:

(a) jedna od dve čestice čiji se sudar proučava miruje[12.2.1], te imamo upadnu česticu i česticu u meti,

(b) upadna čestica je stabilna (tj. ne raspada se) i u osnovnom je stanju pre i posle sudara (u rasejanju).

Nakon sudara može da se desi da se razleti tri ili više čestica. Onda se govori o *spalaciji*. Izučavanje ovog procesa se obično ne uključuje u teoriju sudara. Suprotna je mogućnost da posle sudara imamo samo jednu česticu. Onda se govori o *zahvatu*. Teorija sudara uglavnom izučava slučaj kada i posle sudara imamo upravo dve čestice, ali ne nužno iste kao i pre sudara. Kada su čestice posle sudara iste kao pre, onda se govori o *rasejanju* i teorija sudara se onda svodi na teoriju rasejanja. Ako je i kinetička energija nepromenjena, onda je reč o elastičnom rasejanju, inače o neelastičnom rasejanju. Kada se čestice promene u sudaru, govori se o *reakcijama* ili o *procesima* (kada je čestica u meti jezgro odnosno kada je elementarna čestica).

U svim slučajevima osim u elastičnom rasejanju čestica u meti posle sudara može biti u osnovnom ili u pobuđenom stanju.

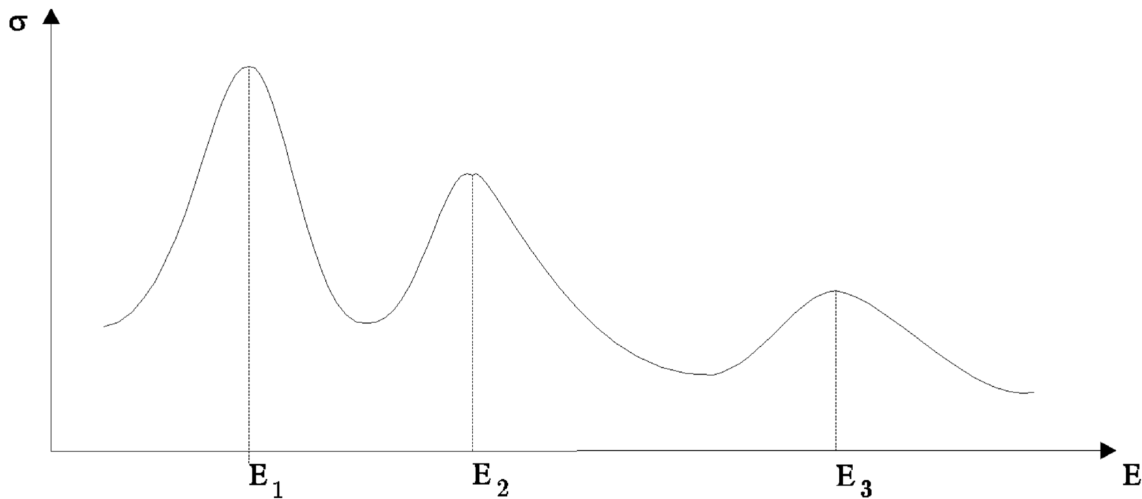
12.2.2 * Rezonantno elastično rasejanje

U celom prethodnom odeljku izučavali smo samo tzv. teoriju *potencijalnog* elastičnog rasejanja. Za ovaj fenomen je karakteristično da se u funkcionalnoj zavisnosti σ_E (presek kao funkcija od energije) *ne* pojavljuju lokalni maksimumi kao na Crtežu C 12.3. Teorijski se pri ovom rasejanju uzimaju u obzir samo rešenja iz kontinualnog spektra hamiltonijana dve čestice.

Često se u eksperimentima elastičnog rasejanja dobijaju krive preseka kao na Crtežu C 12.3. Lokalni maksimumi se obično nazivaju *peak*-ovima[12.2.2]. Tu se radi o izvesnim energijama (relativne čestice) E_1, E_2, E_3, itd. za koje do rasejanja dolazi znatno verovatnije nego za okolne

[12.2.1] Ponekad se (u veoma teškim eksperimentima) izučava i sudar dva snopa.

[12.2.2] Engleski *peak* znači vrh; čitati piik.



Slika 12.3: **Tipična eksperimentalna kriva zavisnosti preseka od energije**.

energije. U ovom slučaju se kaže da se dešava *rezonantno* elastično rasejanje, a *peak*-ovi se nazivaju rezonancama.

Teorijski rezonance potiču od toga što dvočestični hamiltonijan može imati i diskretne svojstvene vrednosti i odgovarajuća prava svojstvena stanja iako smo u regionu pozitivnih energija, tj. u kontinualnom spektru. (To je slučaj kada kontinualni i diskretni spektar hamiltonijana dvočestičnog sistema imaju nekoliko vrednosti E_1, E_2, E_3, itd. zajedničkih.)

12.2.3 * Breit-Wigner-ova formula

Stanja dvočestičnog sistema kojima kao srednja energija odgovara recimo E_0, vrednost koja se poklapa sa nekom zajedničkom vrednošću kontinualnog i diskretnog spektra, nazivaju se *kvazi-stacionarnim stanjima*. Pošto vrednost energije nije oštra, imamo pozitivnu *širinu*[12.2.3] *peak*-a koja se obeležava sa Γ. Zamišlja se da se stvara jedno kvazi-vezano (kvazi-diskretno) stanje složenog sistema (od upadne čestice i čestice u meti), koje je nestabilno pa se raspada opet na upadnu česticu i česticu iz mete (bar tako je pri rezonantnom elastičnom rasejanju; videćemo niže da postoje i rezonantne reakcije kada se produkti raspada razlikuju od čestica pre sudara).

Ispostavlja se da verovatnoća u jedinici vremena da se pomenuto kvazi-vezano stanje raspadne iznosi $\frac{\Gamma}{\hbar}$. Za ovu diskusiju ispustićemo $\hbar$ kao što se obično čini (tj. koriste se atomske jedinice, u kojima je $\hbar = 1$). Pomenuti raspad ima više mogućnosti, tzv. *kanala*: elastično rasejanje, razne kanale neelastičnog rasejanja, razne kanale reakcija itd. Sa svakim kanalom n vezana je jedna verovatnoća (raspada u jedinici vremena) Γ_n, koja se naziva *parcijalnom širinom* pomenutog nivoa E_0 (iako to više nema smisao širine *peak*-a). Imamo $\Gamma = \sum_n \Gamma_n$, pri čemu, naravno, moramo sumirati po svim mogućim kanalima raspada.

[12.2.3] Ova "širina" se ne poklapa sa neodređenošću energije, već se definiše pomoću određenog izraza iz druge korekcije perturbacione teorije. Videti Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика, нерелятивистская теория*, издание третье, Наука, Москва, 1974; primedba 1 u paragrafu 134.

Kao što smo pomenuli, elastično rasejanje je jedan od kanala (jedna vrednost indeksa n). Obeležimo odgovarajuću parcijalnu širinu sa Γ_e ($n = e$). Može se pokazati da je *ukupna amplituda rasejanja* elastičnog rasejanja $f_e(\theta)$ za određenu vrednost l jednaka zbiru amplitude potencijalnog i amplitude rezonantnog rasejanja:

$$\boxed{f_e(\theta) = f_{\mathrm{pot}}(\theta) + f_{\mathrm{rez}}(\theta)} \tag{12.2.1}$$

($f_{\mathrm{pot}}(\theta)$ je u stvari amplituda sabirak u (12.1.46)).

Drugi sabirak je dat izrazom

$$\boxed{f_{\mathrm{rez}}(\theta) = -\tfrac{2l+1}{2k}\,\tfrac{\Gamma_e}{E-E_0+\imath\frac{\Gamma}{2}}\,e^{2\imath\delta_l}\,P_l(\cos\theta)}. \tag{12.2.2}$$

(Naravno, $E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$, a δ_l je fazni pomak iz § 12.1.5.)

Određena vrednost kvantnog broja orbitnog uglovnog momenta l u formulama (12.2.1) i (12.2.2) potiče od činjenice da nivo E_0 dvočestičnog sistema ima određeno l (zapravo dvočestično L, uporediti (4.5.12*b*)). Naime, pretpostavljamo da interakcija ne zavisi od spina. Stoga je ne samo dvočestični J, već i pomenuti $L = l$ dobar kvantni broj. U (12.2.1) i (12.2.2) uzima se upravo l nivoa E_0.

Izraz (12.2.2) naziva se *Breit-Wigner-ova formula*[12.2.4].

Presek se iz amplituda rasejanja izračunava na standardan način (videti (12.1.21)). Navešćemo jedan specijalan slučaj radi ilustracije.

Pri rasejanju *sporih neutrona* na jezgrima ispostavlja se da se možemo ograničiti na $l = 0$, tj. na s-rasejanje. Ispostavlja se, dalje, da *presek ukupnog* elastičnog rasejanja glasi

$$\sigma_e = 4\pi\alpha^2 + \frac{\pi}{k^2}\,\frac{\Gamma_e^2}{(E-E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + \frac{\pi}{k}\,4\alpha\,\frac{\Gamma_e(E-E_0)}{(E-E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}. \tag{12.2.3}$$

Prvi sabirak opisuje potencijalno rasejanje (koje je u ovom slučaju dato u stvari samo jednom konstantom α), drugi sabirak opisuje rezonantno rasejanje, a treći *interferencu* ova dva rasejanja. U neposrednoj blizini nivoa E_0 (tj. kada je $E - E_0$ istog reda veličine kao Γ) σ_e se praktički svodi samo na rezonantni član.

12.2.4 * Neelastično rasejanje

Neka je m masa, a $\mathbf{r}$ radijus vektor relativne čestice; obeležimo sa q sve unutrašnje koordinate[12.2.5] kvantnog sistema u meti, a sa $\hat{H}(q)$ hamiltonijan istog fizičkog sistema. U neelastičnom rasejanju, koje ćemo sad ukratko proučiti, su od velike važnosti pobuđena stanja kvantnog sistema u meti, stoga ćemo se koristiti, u principu, celim spektrom i svojstvenim bazisom od $\hat{H}(q)$.

[12.2.4]Formule rezonantnog rasejanja su prvi izveli Breit i Wigner u radu: *Phys. Rev.* **49**, 519 (1936). Detaljniji prikaz nego prikaz u tekstu dat je u udžbeniku Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика, нерелятивистская теория*, издание третье, Наука, Москва, 1974.

[12.2.5]Sada su naše dve čestice u stvari upadna čestica i centar masa kvantnog sistema u meti. Sa te dve "čestice" prelazimo na relativnu česticu i na centar mase te dve čestice. Osim toga, imamo koordinate q kvantnog sistema u meti oko njegovog centra masa.

Svojstveni problem hamiltonijana sad glasi:

$$\boxed{[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{H}(q) + V(\mathbf{r},q)]\,\varphi(\mathbf{r},q) = E\,\varphi(\mathbf{r},q)}, \tag{12.2.4}$$

gde je $V(\mathbf{r},q)$ multiplikativni operator interakcije između upadne čestice i kvantnog sistema u meti.

Prirodno je poći od neperturbisanog hamiltonijana

$$\hat{H}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \hat{H}(q) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \tag{12.2.5}$$

jer u njemu su dinamički raspregnuti unutrašnji stepeni slobode kvantnog sistema u meti i koordinate relativnog kretanja (∇ deluje samo na $\mathbf{r}$).

Pretpostavimo da smo rešili svojstveni problem od $\hat{H}_0$. Očigledno je da su svojstveni vektori i odgovarajuće svojstvene vrednosti vida:

$$\varphi_{b\mathbf{k}_b} \stackrel{\text{def}}{=} \varphi_b(q)\,e^{\imath\mathbf{k}_b\cdot\mathbf{r}}, \qquad E_{b\mathbf{k}_b} \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_b + \frac{\mathbf{k}_b^2\hbar^2}{2m}, \tag{12.2.6a,b}$$

pri čemu imamo

$$\hat{H}(q)\varphi_b(q) = \varepsilon_q\varphi_b(q), \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\,e^{\imath\mathbf{k}_b\cdot\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{k}_b^2\hbar^2}{2m}\,e^{\imath\mathbf{k}_b\cdot\mathbf{r}}, \quad \forall b,\ \forall\mathbf{k}_b. \tag{12.2.7a,b}$$

Sa b smo obeležili potpun skup kvantnih brojeva koji prebrojava svojstvene vektore od $\hat{H}(q)$.

Pisaćemo $b = a$ za osnovno stanje čestice u meti (b je tekuće, a a je fiksirano). Početni uslov[12.2.6] onda ima vid

$$\varphi_{a\mathbf{k}_a} = \varphi_a\,e^{\imath\mathbf{k}_a\cdot\mathbf{r}}. \tag{12.2.8}$$

Posle interakcije neka je naš dvočestični sistem u krajenjem stanju

$$\varphi_{b\mathbf{k}_b} = \varphi_b\,e^{\imath\mathbf{k}_b\cdot\mathbf{r}}, \tag{12.2.9}$$

gde φ_b može biti pobuđeno stanje kvantnog sistema u meti. Iz održanja energije sledi potreban uslov:

$$\varepsilon_a + \frac{\mathbf{k}_a^2\hbar^2}{2m} = \varepsilon_b + \frac{\mathbf{k}_b^2\hbar^2}{2m}. \tag{12.2.10}$$

Pošto $\mathbf{k}_b^2 \geq 0$, da bi prelaz $\varphi_{a\mathbf{k}_a} \to \varphi_{b\mathbf{k}_b}$ bio moguć, uslov (12.2.10) iziskuje

$$\frac{\mathbf{k}_a^2\hbar^2}{2m} \geq \varepsilon_b - \varepsilon_a, \tag{12.2.11}$$

tj. da raspoloživa energija iz relativnog kretanja bude dovoljna bar za pobuđenje kvantnog sistema u meti.

[12.2.6] Čitalac je verovatno zapazio da iako rasejanje tretiramo kao stacionarno stanje, ipak se koristimo terminima iz druge mogućnosti opisivanja (u koju mi ne ulazimo), u kojoj je rasejanje vremenski zavisan proces. Striktno govoreći, $\varphi_{a\mathbf{k}}$ je deo stanja rasejanja (uporediti formulu (12.2.15)) koji opisuje upadnu česticu i kvantni sistem u meti bez interakcije između njih ("pre interakcije").

Ako važi nejednakost (12.2.11), kaže se da je *kanal b otvoren* (tj. dotični prelaz je moguć); ako (12.2.11) ne važi, govori se o *zatvorenom kanalu.*

Kada se razmatranje iz § 12.1.3 uopšti na neelastično rasejanje, dobija se sledeća *asimptotska forma* stanja rasejanja:

$$\boxed{\varphi(\mathbf{r}, q) = \varphi_{a\mathbf{k}_a} + \sum_b \varphi_b(q)\, f_{ba}(\theta_b, \varphi_b)\, \frac{e^{\imath k_b r}}{r}, \qquad r \to \infty}, \tag{12.2.12}$$

gde je $f_{ba}(\theta_b, \varphi_b)$ *amplituda rasejanja iz početnog kanala a u kanal b*, a θ_b i φ_b su sferni polarni uglovi vektora $\mathbf{k}_b$, talasnog vektora relativne čestice u kanalu b.

Diferencijalni presek rasejanja iz kanala a u kanal b glasi

$$\boxed{\sigma_{ba}(\theta_b, \varphi_b) = \frac{k_b}{k_a} |f_{ab}(\theta_b, \varphi_b)|^2}. \tag{12.2.13}$$

Elastično rasejanje je uključeno u s(12.2.12) i (12.2.13). Naime, ako sva pobuđena stanja kvantnog sistema u meti leže visoko, tj. $\varepsilon_b \gg \varepsilon_a$, $\forall b \neq a$, onda su norme odgovarajućih amplituda rasejanja f_{ba} veoma male. Relacije s(12.2.12) i (12.2.13) se onda u dobroj približnosti svode na

$$\varphi(q, \mathbf{r}) \approx \varphi_a(q)\{e^{\imath \mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}} + f_{aa}(\theta_a, \varphi_a)\, \frac{e^{\imath k_a r}}{r}\}, \qquad r \to \infty, \tag{12.2.14a}$$

$$\sigma_{aa}(\theta_a, \varphi_a) = |f_{aa}(\theta_a, \varphi_a)|^2. \tag{12.2.14b}$$

Unutrašnje stanje $\varphi_a(q)$ je onda irelevantno, možemo ga izostaviti (zajedno sa unutrašnjim koordinatama q na levoj strani od (12.2.14a)) i tako dolazimo do izrazâ (12.1.19) i (12.1.21) (potpunije rečeno $f_{aa} = f_{\text{pot}} + f_{\text{rez}}$).

Svi neelastični kanali su rezonantne prirode zbog (12.2.10), što se u funkcionalnoj zavisnosti ukupnog (u odnosu na uglove) preseka $\sigma_{ba}(k_a)$ od k_a ispoljava kao *peak.*

12.2.5 * Lippmann-Schwinger-ova jednakost

Kao što smo videli u prethodnom odeljku, amplitude rasejanja se dobijaju iz vektora stanja koji je rešenje zakona kretanja. Radi izučavanja tog rešenja, pogodno je prevesti diferencijalnu formu zakona kretanja u integralnu, koja inkorporira i granični uslov asimptotske forme preko pogodno odabranih Green-ovih funkcija (slično smo činili u § 12.1.4).

Ispostavlja se da u slučaju neelastičnog rasejanja pomenuta integralna jednakost, ekvivalentna (12.2.4) plus (12.2.2), može da se napiše na sledeći način:

$$\begin{aligned}\varphi(q, \mathbf{r}) = \varphi_{a\mathbf{k}_a} \quad &- \quad \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_b \varphi_b(q) \int \varphi_b^*(q')\, \frac{e^{\imath k_b |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, V(q', \mathbf{r}')\varphi(q', \mathbf{r}')\, \mathrm{d}q'\, \mathrm{d}\mathbf{r}' + \\ &+ \sum_{b'} \int g_b'(q\mathbf{r}|q'\mathbf{r}')\, V(q', \mathbf{r}')\, \varphi(q', \mathbf{r}')\, \mathrm{d}q'\, \mathrm{d}\mathbf{r}',\end{aligned} \tag{12.2.15}$$

gde je $\varphi_{a\mathbf{k}_a}$ dat sa (12.2.8); u zbiru $\sum_b$ se sumira po svim otvorenim kanalima, a u zbiru $\sum_b'$ po svim zatvorenim kanalima (tj. po slučajevima $k_{b'}^2 < 0$); k_b se određuje iz održanja energije (12.2.10). Green-ova funkcija g_b' zatvorenog kanala b' data je obrascem:

$$g_b'(q\mathbf{r}|q'\mathbf{r}') = \frac{m}{4\pi^2\hbar^2}\, \varphi_{b'}(q)\varphi_{b'}^*(q') \int \frac{e^{\imath \mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{k_{b'}^2 - k'^2 + \imath\eta}\, \mathrm{d}\mathbf{k}', \tag{12.2.16}$$

a $k_{b'}^2$ je opet određen sa (12.2.10).

Jednakost (12.2.15) sa (12.2.16) se često piše simbolički u vidu

$$\boxed{\varphi = \varphi_{a\mathbf{k}_a} + \frac{\hat{V}}{E_{a\mathbf{k}_a} - \hat{H}_0 + \imath\eta}\,\varphi}. \tag{12.2.17}$$

Relacija (12.2.17) i puna forma od (12.2.17) data sa (12.2.15) plus (12.2.16) naziva se *Lippmann-Schwinger-ovom jednakošću*[12.2.7].

U stvari (12.2.4) se pomoću notacije iz (12.2.5) može napisati kao

$$(E_{a\mathbf{k}_a} - \hat{H}_0)\,\varphi = \hat{V}\,\varphi, \tag{12.2.18}$$

jer $E = E_{a\mathbf{k}_a}$, tj. energija stanja rasejanja φ je u stvari energija ulaznog kanala. Green-ove funkcije za otvorene i zatvorene kanale u (12.2.15) upravo i služe invertovanju singularnog operatora $E_{a\mathbf{k}_a} - \hat{H}_0$ (uzimajući u obzir i granični uslov). Imaginarni sabirak $\imath\eta$ je u (12.2.17) simboličan, a u (12.2.16) η je mali pozitivan broj koji određuje kako da se zaobiđe pol (singularitet) u kompleksnoj ravni (nakon izračunavanja integrala treba uzeti limes $\eta \to 0$).

12.2.6 * Reakcije

Na kraju, bez ikakvog ulaženja u teoriju reakcija, neophodno je istaći zašto forma hamiltonijana u (12.2.4), na kojoj je zasnovana teorija neelastičnog rasejanja, ne obuhvata istovremeno i kanale reakcija.

Vid ukupnog hamiltonijana

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 + \hat{H}(q) + V(\mathbf{r},q) = \hat{H}(\mathbf{r},q), \tag{12.2.19}$$

čiji je svojstveni problem (12.2.4), očigledno je takav da su u $\hat{H}(q)$ u stvari sadržane sve čestice koje ulaze u sastav kvantnog sistema u meti, a upadna čestica interaguje sa njima preko $V(\mathbf{r},q)$. Ovaj vid hamiltonijana ima kao premisu pretpostavku da možemo zanemariti pregrupisavanje čestica, koje bi moglo dovesti do izletanja neke druge (a ne upadne) čestice.

Hamiltonijan koji bi bio tačniji nego (12.2.19) i obuhvatao i opisivanje kanala reakcija bi morao da tretira na simetričan način interakcije među svim česticama u složenom sistemu (tj. u sistemu upadna čestica plus kvantni sistem u meti). Upadna čestica bi igrala izdvojenu ulogu samo u početnom uslovu, tj. u jednom sabirku u stanju sudara (što bi bilo uopštenje stanja rasejanja).

Slično bi se opisivali i procesi elementarnih čestica (zamišljajući česticu u meti kao složenu od elementarnijih delova, kvarkova ili partona itd. i primenjujući relativističku kvantnu mehaniku).

[12.2.7] Originalna referanca glasi: B. A. Lippmann and J. Schwinger, *Phys. Rev.* **79**, 469 (1950). Nešto detaljniji prikaz nego u tekstu dat je u udžbeniku: А. С. Давидов, *Квантовая механика*, Москва, 1963.

Dodatak A

GRUPA ROTACIJA I ANGULARNI MOMENT (M. Damnjanović)

Cilj ovog dodatka je da teoriju angularnog momenta u kvantnoj mehanici izloži na grupno-teorijski način, uspostavljanjem veze angularnog momenta sa grupom rotacija. Time bi trebalo da se čitaocu koji je ovladao osnovnim znanjima o Lie-jevim grupama omogući alternativno, i možda brže sagledavanje problematike obrađene u glavama 6 i 7.

Dodatak počinje definicijom grupe SO(3) i njenom identifikacijom sa grupom rotacija u trodimenzionalnom prostoru. Zatim se uvodi grupa SU(2) kao univerzalno prekrivajuća, da bi u preostalom delu, korišćenjem teorije grupa, bile razmatrane ireducibilne reprezentacije SU(2). Posebna pažnja je posvećena redukovanju direktnih proizvoda ireducibilnih reprezentacija SU(2), kao matematičkom okviru za tzv. slaganje angularnih momenata.

A.1 Osnovne osobine grupe rotacija

U ovom odeljku će se analizom intuitivnog pojma rotacije u trodimenzionalnom Euklidovom prostoru uspostaviti veza sa grupom SO(3). Zatim će biti ukazano na one osobine ove grupe koje su relevantne za kasniju analizu angularnog momenta.

A.1.1 Grupa rotacija i SO(3)

Svaka rotacija u trodimenzionalnom Euklidovom prostoru je određena *ortom* $\mathbf{u}$ i *uglom* ξ za koji se vrši rotacija (uzima se da je ugao pozitivan ako je u pitanju desna rotacija u odnosu na odabrani ort). Oznaka ovako definisane rotacije je $R_{\xi\mathbf{u}}$ ili, kraće, $R_{\boldsymbol{\xi}}$, gde se vektor $\boldsymbol{\xi} = \xi\mathbf{u}$ naziva *vektor rotacije*. Pošto je $R_{(2\pi-\xi)\mathbf{u}} = R_{\xi(-\mathbf{u})}$, ugao ξ se uvek može uzeti iz intervala $[0, \pi]$.

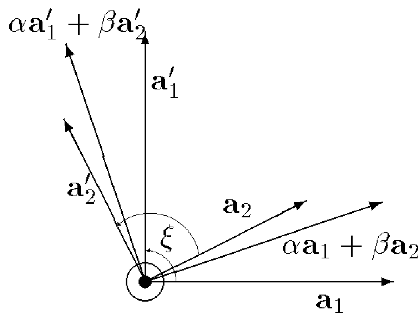
Neka su $\mathbf{a}_1$ i $\mathbf{a}_2$ vektori iz Euklidovog prostora, koji se rotacijom $R_{\boldsymbol{\xi}}$ preslikaju u $\mathbf{a}'_i = R_{\boldsymbol{\xi}}\mathbf{a}_i$ $(i = 1, 2)$. Lako je zapaziti da (videti crtež C A.1):

i) ako je vektor $\alpha\mathbf{a}_1 + \beta\mathbf{a}_2$ proizvoljna linearna kombinacija vektora $\mathbf{a}_1$ i $\mathbf{a}_2$, njegovom rotacijom se dobija vektor koji je linearna kombinacija rotiranih vektora sa istim koeficijentima, tj. $R_{\boldsymbol{\xi}}(\alpha\mathbf{a}_1 + \beta\mathbf{a}_2) = \alpha\mathbf{a}'_1 + \beta\mathbf{a}'_2$;

ii) dužine vektora $\mathbf{a}_1$ i $\mathbf{a}_2$ jednake su dužinama rotiranih vektora ($\mathbf{a}'_1$ i $\mathbf{a}'_2$, respektivno), a i ugao izmedju početnih vektora jednak je uglu među rotiranim vektorima;

iii) ort rotacije, $\mathbf{u}$, pri rotaciji ostaje nepromenjen, a vektori iz ravni orogonalne na $\mathbf{u}$ ostaju nakon rotacije u istoj ravni.

Osobina i) ukazuje da je svaka rotacija linearni operator u Euklidovom prostoru, a na osnovu zapažanja ii) sledi da ovaj operator ne menja skalarni proizvod vektora, tj. da je ortogonalan. Konačno, poslednja osobina pokazuje da je $\mathbf{u}$ svojstveni vektor za $R_{\boldsymbol{\xi}}$ za svojstvenu vrednost 1, dok je ravan ortogonalna na $\mathbf{u}$ invarijantna.



Slika A.1: **Rotacija** *za ξ oko ose normalne na crtež.*

Nakon ovog zaključka, rotacija $R_{\boldsymbol{\xi}}$ može se, kao i svaki linearni operator u $\mathbb{R}^3$, reprezentovati realnom matricom tipa 3×3. Pri tome, ako se za reprezentovanje iskoristi ortonormirani bazis, mora se dobiti ortogonalna matrica. Specijalno, ako se za reprezentovanje odabere bazis ortonormirani $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3 \overset{\text{def}}{=} \mathbf{u}\}$, nastao dopunjavanjem orta rotacije ortonormiranim vektorima $\mathbf{u}_1$ i $\mathbf{u}_2$, dobija se matrica

$$R(\boldsymbol{\xi}) = \begin{pmatrix} \cos\xi & -\sin\xi & 0 \\ \sin\xi & \cos\xi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A.1.1}$$

Njena determinanta je 1, tj. to je matrica iz specijalne ortogonalne grupe $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$, a trag joj je

$$\mathrm{Tr}\, R(\boldsymbol{\xi}) = 1 + 2\cos\xi. \tag{A.1.2}$$

Time je pokazano da je svaka rotacija specijalni ortogonalni operator (determinanta ne zavisi od bazisa). Sa druge strane, poznato je da elementi grupe $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$ pogodnim izborom bazisa dobijaju formu (A.1.1) za neko ξ, definisano tragom operatora (takođe ne zavisi od bazisa). Stoga je jasno da imaju jedan svojstveni vektor za svojstvenu vrednost 1, a da je ortokomplement ovog vektora invarijantna ravan. Sledi da svaka specijalna ortogonalna transformacija opisuje rotaciju oko svog svojstvenog vektora za ugao ξ, koji je određen tragom operatora, i da je ova veza rotacija i grupe $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$ bijektivna[A.1.1].

Rezimirajući prethodna razmatranja, zaključuje se da je skup rotacija zapravo grupa $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$, specijalnih ortogonalnih transformacija trodimenzionalnog Euklidovog prostora. Stoga je za proučavanje rotacija moguće, i to kao veoma efikasan metod, koristiti aparat teorije grupa.

Zadatak A.1.1 Pokazati da za proizvoljne dve rotacije važi

$$R_{\boldsymbol{\xi}} R_{\boldsymbol{\psi}} R_{\boldsymbol{\xi}}^{-1} = R_{R_{\boldsymbol{\xi}}\boldsymbol{\psi}}. \tag{A.1.3}$$

(Uputstvo: Pošto je reč o konjugaciji u grupi, rezultat je rotacija. Istovremeno je to i transformacija sličnosti, te je trag nepromenjen. Proveriti da je $R_{\boldsymbol{\xi}}\boldsymbol{\psi}$ svojstveni vektor $R_{\boldsymbol{\xi}} R_{\boldsymbol{\psi}} R_{\boldsymbol{\xi}}^{-1}$ za svojstvenu vrednost 1.)

[A.1.1] Naime, ako je A specijalni ortogonalni operator, rešavanjem njegovog svojstvenog problema se mora dobiti svojstvena vrednost 1 ili kao nedegenerisana ili kao trostruka. U drugom slučaju je to jedinična matrica, kojoj odgovara rotacija za ugao $\xi = 0$ (oko bilo koje ose). U prvom slučaju je ugao $\xi = \arccos\frac{\mathrm{Tr}\, A - 1}{2}$ određen jednoznačno unutar intervala $\xi \in [0, \pi]$, dok je svojstveni ort $\mathbf{u}$ određen do na znak; uslovom da se u *desnom* bazisu $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}\}$ operator A reprezentuje matricom (A.1.1), fiksira se i znak orta $\mathbf{u}$.

A.1.2 Parametrizacije rotacione grupe

Kao što je već uočeno, rotacija je određena svojim ortom **u** i uglom ξ, koji je iz intervala $[0,\pi]$. Skup svih rotacija se stoga može predstaviti (zatvorenom) loptom radijusa π: svaka tačka te lopte je vektor $\boldsymbol{\xi}$, čiji su ort i dužina u stvari osa, odnosno ugao rotacije. No, za prouzvoljni ort **u**, vektori $\pi\mathbf{u}$ i $\pi(-\mathbf{u})$, tj. suprotne tačke jednog prečnika lopte su zapravo ista rotacija, jer je očigledno da se rotacijom za π oko iste prave, bez obzira na odabrani smer rotacije, dobija isti rezultat. Stoga je grupu rotacija moguće opisati tzv. *π-loptom*, a to je mnogostrukost koja se dobija kada se na lopti radijusa π identifikuju parovi suprotnih krajnjih tačaka svakog prečnika[A.1.2]. Tri Descartes-ove komponente vektora $\boldsymbol{\xi}$, tj. (ξ_1,ξ_2,ξ_3) su tzv. *parametri π-lopte* grupe rotacija.

Zadatak A.1.2 Pokazati da je matrica rotacije u Descartes-ovom bazisu u kojem vektor rotacije i ort **u** imaju komponente (ξ_1,ξ_2,ξ_3) i (u_1,u_2,u_3) respektivno, data matričnim elementima:

$$R_{ij}(\boldsymbol{\xi})=\cos\xi\delta_{ij}+(1-\cos\xi)\frac{\xi_i\xi_j}{\xi^2}-\sum_{k=1}^{3}\epsilon_{ijk}\sin\xi\frac{\xi_k}{\xi}=\cos\xi\delta_{ij}+(1-\cos\xi)u_iu_j-\sin\xi\sum_{k=1}^{3}\epsilon_{ijk}u_k. \tag{A.1.4}$$

Posebno, pokazati da su matrice rotacija za ξ oko Descartes-ovih ortova

$$R(\xi,0,0)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos\xi&-\sin\xi\\0&\sin\xi&\cos\xi\end{pmatrix},R(0,\xi,0)=\begin{pmatrix}\cos\xi&0&\sin\xi\\0&1&0\\-\sin\xi&0&\cos\xi\end{pmatrix},R(0,0,\xi)=\begin{pmatrix}\cos\xi&-\sin\xi&0\\\sin\xi&\cos\xi&0\\0&0&1\end{pmatrix}. \tag{A.1.5}$$

Kako je $R^{-1}(\boldsymbol{\xi})=R(-\boldsymbol{\xi})$ i $I_3=R(0)$, parametri π-sfere su prirodni parametri[A.1.3].

Druga uobičajena parametrizacija grupe rotacija je pomoću *Euler-ovih uglova*. Neka se rotacijom R Descartes-ov bazis $\{\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\mathbf{e}_3\}$ preslika u bazis $\{\mathbf{E}_1,\mathbf{E}_2,\mathbf{E}_3\}$. Neka je presek ravni $\mathbf{e}_1O\mathbf{e}_2$ i $\mathbf{E}_1O\mathbf{E}_2$ tzv. *čvorna linija*, čiji je ort $\mathbf{e}'_1$. Kako oba orta leže u ravni $\mathbf{e}_1O\mathbf{e}_2$, ortogonalnoj na $\mathbf{e}_3$, rotacijom oko $\mathbf{e}_3$ za neki ugao $\alpha\in[0,2\pi]$, ort $\mathbf{e}_1$ se preslikava[A.1.4] u ort $\mathbf{e}'_1$: $R_{\alpha\mathbf{e}_3}\mathbf{e}_1=\mathbf{e}'_1$. Pri tome se $\mathbf{e}_2$ preslikao u neki ort $\mathbf{e}'_2$, dok je $\mathbf{e}_3$ ostao nepromenjen ($\mathbf{e}'_3=\mathbf{e}_3$). Sa druge strane, $\mathbf{e}_3$ i $\mathbf{E}_3$ su ortogonalni na $\mathbf{e}'_1$, i rotacijom za neki ugao $\beta\in[0,\pi]$ (smer orta $\mathbf{e}'_1$ se uvek može tako odrediti) oko $\mathbf{e}'_1$ se $\mathbf{e}_3$ preslika u $\mathbf{E}_3$: $R_{\beta\mathbf{e}'_1}\mathbf{e}_3=\mathbf{E}_3$. Pri tome je ort $\mathbf{e}'_2$ preslikan u ort $\mathbf{e}''_2$, dok je ort $\mathbf{e}'_1$ ostao nepromenjen (tj. $\mathbf{e}''_1=\mathbf{e}'_1$; pogodno je privremeno obeležiti i ort $\mathbf{E}_3$ kao $\mathbf{e}''_3$). Sada se iskoristi činjenica da je $\mathbf{e}''_1$ (čvorna linija) zajedno sa $\mathbf{E}_1$ u ravni ortogonalnoj na $\mathbf{E}_3$, pa se rotacijom za novi ugao $\gamma\in[0,2\pi]$ oko $\mathbf{e}''_3=\mathbf{E}_3$, ort $\mathbf{e}''_1$ preslika u $\mathbf{E}_1$: $R_{\gamma\mathbf{E}_3}\mathbf{e}''_1=\mathbf{E}_1$. Jasno, $\mathbf{E}_3$ je nepromenjen, te je ovim postupkom dobijen bazis $\{\mathbf{E}_1,\mathbf{E}_2,\mathbf{E}_3\}$ (ort $\mathbf{e}''_2$ mora biti preslikan u $\mathbf{E}_2$, jer rotacije

[A.1.2]Intuitivno, identifikaciju treba shvatiti tako da se tačke iz jednog para slepe jedna sa drugom. Tako npr. ako se posmatra jednodimenzionalna π-lopta, tj. interval $[-\pi,\pi]$, procedura daje kružnicu, koja je, mada sama jednodimenzionalna mnogostrukost, smeštena u ravni, a i za lepljenje je bila potrebna dodatna dimenzija. Za dvodimenzionalni slučaj kruga radijusa π, uz nešto mašte (i nakon zasecanja dužjednog radijusa), može se nazreti neobična površ koja odgovara π-krugu. Naznačena identifikacija na trodimenzionalnoj π-lopti zahteva dodatne dimenzije, te ni obična mašta, izoštrena samo na trodimenzionalnim telima, neće dočarati konačni objekat (očigledno nezamisliv!). Elementarni uvod u ovakve teme, sve češće u modernoj fizici, izložen je u knjižici В. Г. Болтянский, В. А. Ефремович, *Наглядная Топология*, Библиотечка "Квант", **21**, Наука, Москва, 1982.

[A.1.3]Kaže se da su parametri prirodni ako se za njihovu nultu vrednost dobija jedinični element grupe, a promenom znaka inverzni element.

[A.1.4]Analogno je moguće, kao u glavi 6, rotirati $\mathbf{e}_2$ do čvorne linije, čime se dobija druga definicija Euler-ovih uglova. Obe konvencije su ravnopravno zastupljene u literaturi.

ne menjaju orijentaciju bazisa, a dva njegova vektora su već dovedena do poklapanja!). Jasno je stoga da je rotacija R zapravo kompozicija tri rotacije: $R \stackrel{\text{def}}{=} R[\alpha,\beta,\gamma] = R_{\gamma\mathbf{E}_3} R_{\beta\mathbf{e}'_1} R_{\alpha\mathbf{e}_3}$. Koristeći vezu među bazisima koji se javljaju u prethodnom razmatranju,

$$\begin{pmatrix}\mathbf{e}_1\\ \mathbf{e}_2\\ \mathbf{e}_3\end{pmatrix} \stackrel{R_{\alpha\mathbf{e}_3}}{\to} \begin{pmatrix}\mathbf{e}'_1\\ \mathbf{e}'_2\\ \mathbf{e}_3=\mathbf{e}'_3\end{pmatrix} \stackrel{R_{\beta\mathbf{e}'_1}}{\to} \begin{pmatrix}\mathbf{e}''_1=\mathbf{e}'_1\\ \mathbf{e}''_2\\ \mathbf{e}''_3=\mathbf{E}_3\end{pmatrix} \stackrel{R_{\gamma\mathbf{e}''_1}}{\to} \begin{pmatrix}\mathbf{E}_1\\ \mathbf{E}_2\\ \mathbf{E}_3\end{pmatrix},$$

uz korišćenje relacije (A.1.3) nalazi se

$$R[\alpha,\beta,\gamma] = R_{\alpha\mathbf{e}_3} R_{\beta\mathbf{e}_1} R_{\gamma\mathbf{e}_3}. \tag{A.1.6}$$

Zamenom matrica rotacija oko Descartes-ovih osa, (A.1.5), dobija se matrica rotacije zadate Euler-ovim uglovima:

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix}\cos\alpha\cos\gamma-\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma & -\cos\alpha\sin\gamma-\sin\alpha\cos\beta\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta\\ \sin\alpha\cos\gamma+\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma & -\sin\alpha\sin\gamma+\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma & -\cos\alpha\sin\beta\\ \sin\beta\sin\gamma & \sin\beta\cos\gamma & \cos\beta\end{pmatrix}. \tag{A.1.7}$$

Zadatak A.1.3 Proveriti relacije (A.1.6) i (A.1.7). (Uputstvo za prvi deo: $R_{\beta\mathbf{e}'_1} = R_{\beta R_{\alpha\mathbf{e}_3}\mathbf{e}_1} = R_{\alpha\mathbf{e}_3} R_{\beta\mathbf{e}_1} R^{-1}_{\alpha\mathbf{e}_3}$.)

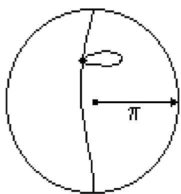
Zadatak A.1.4 Pokazati da je $R^{-1}(\alpha,\beta,\gamma) = R(\pi-\gamma,\beta,\pi-\alpha)$. Da li su Euler-ovi uglovi prirodni parametri?

A.1.3 Osnovne osobine grupe SO(3)

Neke značajne (za teoriju angularnog momenta) karakteristike grupe SO(3) najlakše se određuju razmatranjem topoloških osobina π-lopte, tj. prostora parametara.

Odmah se vidi da su matrice koje opisuju rotacije glatke po sva tri parametra, te je SO$(3,\mathbb{R})$ Lie-jeva grupa. Dalje, π-lopta je ograničena i zatvorena, dakle kompaktna trodimenzionalna mnogostrukost, pa je SO(3) *kompaktna grupa*. Posledica ovoga je postojanje tzv. *invarijantne mere* (ili integrala) na grupi, što dalje rezultuje za fiziku izuzetno značajnom osobinom (zajedničkom za sve kompaktne grupe):

Teorem A.1.1 *Svaka reprezentacija grupe rotacija ekvivalentna je unitarnoj, i može biti ili ireducibilna ili razloživa na ireducibilne. Sve ireducibilne reprezentacije su konačnodimenzionalne.*



Slika A.2: **Različite petlje u** SO$(3,\mathbb{R})$**.**

Svake dve tačke π-lopte se mogu spojiti krivom koja u celini pripada π-lopti. To znači da je grupa rotacija povezana, te da je sve njene ireducibilne reprezentacije moguće odrediti kao (eksponencirane) ireducibilne reprezentacije odgovarajuće Lie-jeve algebre. Međutim, ako se posmatraju petlje iz neke tačke (tj. krive koje počinju i završavaju u istoj tački), može se naći ukupno dve različite klase, koje se ne mogu neprekidnim transformacijama (bez kidanja, preciznije, homotopnim preslikavanjima) prevesti jedna u drugu (na Crtežu A.2 su obe krive petlje; jedna je to očigledno, a druga zato što spaja suprotne tačke istog prečnika, a to je isti element grupe). To znači da prostor parametara nije *prosto povezan*, već kako se

ponekad kaže *dvostruko povezan*[A.1.5]. Ovo ima za posledicu postojanje dvostruko veće univerzalno prekrivajuće grupe, i to je kao što će se pokazati, grupa unitarnih dvodimenzionalnih matrica sa determinantom 1, SU(2).

Za povezane grupe je poznato da njihove različite ireducibilne reprezentacije daju različite ireducibilne reprezentacije njihovih Lie-jevih algebri. Obrnuto važi samo za prosto povezane grupe. Za $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, pošto je dvostruko povezana, polovina ireducibilnih reprezentacija odgovarajuće Lie-jeve algebre će dati sve različite ireducibilne reprezentacije grupe, dok ostatak uopšte neće dati prave, već tzv. *dvoznačne reprezentacije* grupe. Preciznije, ireducibilne reprezentacije Lie-jeve algebre grupe $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ su u bijektivnoj vezi sa ireducibilnim reprezentacijama univerzalno prekrivajuće grupe SU(2). Stoga će, relativno jednostavna tehnika razvijena za Lie-jeve algebre (izložena u paragrafu A.2.3), dati reprezentacije Lie-jeve algebre, time i grupe SU(2), a ne grupe $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$; polovina od njih su dvoznačne reprezentacije grupe $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Međutim, otkriće polucelobrojnog spina nekih čestica je ukazalo na činjenicu da su upravo grupa SU(2), dakle i *sve* njene reprezentacije, relevantni za fiziku. Rotacije pojedinačnih objekata u trodimenzionalnom prostoru, od kojih je, na osnovu iskustva prirodno poći, samo su jedna, i to ne sasvim verna slika stvarne simetrije prirode.

A.1.4 * Grupa SU(2)

Grupa SU(2) je skup dvodimenzionalnih unitarnih matrica sa determinantom jednakom jedinici, tj. matrica $U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ za koje je $\det U = ad - bc = 1$ i $\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} = U^\dagger = U^{-1} = \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a^* \end{pmatrix}$. Stoga se svaki element ove grupe može predstaviti u obliku:

$$U(a,b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \text{ uz uslov } |a|^2 + |b|^2 = 1, \tag{A.1.8}$$

gde su a i b kompleksni brojevi, tzv. *Cayley-Klein-ovi parametri*.

Jednakostima $a = u_0 + \imath u_1$ i $b = u_2 + \imath u_3$, grupa SU(2) se zadaje pomoću četiri realna parametra, koji zadovoljavaju uslov iz $\sum_{i=0}^4 u_i^2 = |a|^2 + |b|^2 = 1$. Stoga elementi ove grupe predstavljaju tačke jedinične sfere S^3 u četvorodimenzionalnom prostoru, i cela grupa se može smatrati ovom sferom. Sfera S^3 je trodimenzionalna mnogostrukost, pri tome kompaktna, povezana i prosto povezana.

Zadatak A.1.5 Pokazati da se matrice iz SU(2) mogu napisati u obliku $U(u_0, \mathbf{u}) \stackrel{\text{def}}{=} u_0 I_2 + \imath \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, gde su u_i ($i = 0, 1, 2, 3$) realni brojevi, a $\boldsymbol{\sigma}$ ranije definisane Pauli-jeve matrice.

Drugu važnu parametrizaciju grupe SU(2) daju *Euler-ovi uglovi*. Pokazuje se da je opšti oblik matrice iz SU(2) zadat i sa:

$$U(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} e^{\imath\frac{\alpha+\gamma}{2}} & \imath \sin\frac{\beta}{2} e^{\imath\frac{\gamma-\alpha}{2}} \\ \imath \sin\frac{\beta}{2} e^{\imath\frac{\alpha-\gamma}{2}} & \cos\frac{\beta}{2} e^{-\imath\frac{\alpha+\gamma}{2}} \end{pmatrix}, \quad \alpha \in [0, 2\pi],\ \beta \in [0,\pi],\ \gamma \in [0, 4\pi]. \tag{A.1.9}$$

Može se uočiti da promena parametra γ za 2π ne ostavlja matricu $U(\alpha,\beta,\gamma)$ nepromenjenom (kao kod $R(\alpha,\beta,\gamma)$), već se dobija matrica suprotnog znaka. Tek promena za 4π daje istu matricu.

[A.1.5] Preciznije, *fundamentalna grupa* rotacione grupe je drugog reda (i samim tim mora biti ciklična grupa $\mathbf{C}_2$).

Slično grupi rotacija, grupa SU(2) se može parametrizovati 2π-loptom. U stvari, pokazuje se da se matrice iz SU(2) mogu izraziti pomoću različitih vektora dužine $\xi \in [0, 2\pi]$, u formi:

$$U(\boldsymbol{\xi}) \stackrel{\text{def}}{=} \cos\frac{\xi}{2} I_2 + \imath \sin\frac{\xi}{2} \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{\xi}. \tag{A.1.10}$$

Zadatak A.1.6 Proveriti da je (A.1.10) opšti oblik za elemente iz $SU(2)$ i izračunati matricu $U(\boldsymbol{\xi})$.

Zadatak A.1.7 Već je utvrđeno da je SU(2) prosto povezana. Sa druge strane, iz (A.1.10) se vidi da je $U(2\pi\mathbf{u}) = U(2\pi(-\mathbf{u}))$, a ovo je kod $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$ uzrokovalo dvostruku povezanost. Objasniti.

Prosta povezanost grupe SU(2) povlači da je ova grupa univerzalno prekrivajuća za celu klasu Lie-jevih grupa (sa jednakim Lie-jevim algebrama). Sve grupe ove klase su izomorfne sa nekom od faktor grupa $\mathrm{SU}(2)/Z_i$, gde su sa Z_i obeležene različite diskretne invarijantne podgrupe SU(2). Poznato je da su, kao kod svih prosto povezanih grupa, sve ovakve podgrupe iz centra grupe SU(2). Sa druge strane, grupa SU(2) je očigledno ireducibilan skup matrica, tj. ne postoji zajednički invarijantni potprostor za sve matrice grupe. Stoga, po Schur-ovoj lemi, svaka matrica koja komutira sa svim matricama grupe mora biti skalarna, cI_2. Među ovakvim matricama, samo $\pm I_2$ pripadaju SU(2), te je $Z = \{I_2, -I_2\}$ centar grupe SU(2).

Jedine podgrupe centra su trivijalne, $\{I_2\}$ i sam centar Z. Faktor grupa po jediničnom elementu je očigledno izomorfna samoj grupi SU(2). Faktor grupa po centru je grupa rotacija, o čemu govori

Teorem A.1.2 *Grupa* SO(3) *je homomorfan lik od* SU(2), *pri čemu je kernel homomorfizma upravo centar grupe* SU(2), *tj. važi* $\mathrm{SU}(2)/Z \cong \mathrm{SO}(3)$. *Preslikavanje h, definisano sa*

$$h(U(a,b)) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2}) & \frac{\imath}{2}(a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2}) & ab + a^*b^* \\ \frac{\imath}{2}(a^{*2} - a^2 + b^2 - b^{*2}) & \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2}) & \imath(a^*b^* - ab) \\ -a^*b - ab^* & \imath(a^*b - ab^*) & aa^* - bb^* \end{pmatrix},$$

je homomorfizam SU(2) *na* SO(3) *sa kernelom* Z.

Dokaz: Neka je $R(a,b) = h(U(a,b))$. Iz $|a|^2 + |b|^2 = 1$ sledi da je $R(a,b)$ iz SO(3). Direktnom proverom se pokazuje da važi $h(U(a,b)U(a',b')) = R(a,b)R(a',b') = h(U(a,b))h(U(a,b'))$, tj. h je homomorfizam. Specijalno, važi $h(U(\alpha,\beta,\gamma)) = R(\alpha,\beta,\gamma)$ (uporediti sa (A.1.7) i (A.1.9)), tako da se za sve različite vrednosti psrametara SU(2) dobija cela grupa SO(3). Svaki element SO(3) se pri tome dobija dva puta, jer je očigledno iz definicije h da je $h(U(a,b)) = h(U(-a,-b))$, tj. kernel homomorfizma h je centar grupe SU(2). *Q. E. D.*

Zadatak A.1.8 U koje matrice iz SO(3) se homomorfizmom h preslikavaju matrice $U(\alpha,\beta,\gamma)$ i $U(\boldsymbol{\xi})$? Koji par matrica se preslikava u $R(\alpha,\beta,\gamma)$, a koji u $R(\boldsymbol{\xi})$?

Iz teorema T A.1.2 sledi da je SU(2) univerzalno prekrivajuća grupa za SO(3), i kako je $h(U) = h(-U)$, prekrivanje je dvostruko, tj. svakom elementu SO(3) odgovaraju dva elementa SU(2) suprotnog znaka. Ovo znači i da se SO(3) može parametrizovati polovinom sfere S^3, i u tom smislu se o a i b govori kao o Cayley-Klein-ovim parametrima grupe SO(3). Treba napomenuti da se u okolini jediničnog elementa SU(2) samo po jedan element ove grupe preslikava u okolinu jediničnog elementa SO(3), tj. SU(2) i SO(3) su *lokalno izomorfne grupe*. Odavde neposredno sledi izomorfizam njihovih Lie-jevih algebri.

A.1.5 Lie-jeva algebra rotacione grupe

Kao što je već rečeno, Lie-jeve algebre grupa SU(2) i SO(3) su izomorfne i zajednička oznaka im je su(2). Pošto su SU(2) i SO(3) troparametarske grupe, *dimenzija ove algebre je* $n = 3$. Kao i svaka Lie-jeva algebra, su(2) je određena strukturnim konstantama, tj. komutacionim relacijama vektora nekog bazisa.

Jedan bazis su(2) čine tri generatora rotacija oko koordinatnih osa (to su generatori jednoparametarskih podgrupa parametara π-sfere). Matrice generatora se nalaze diferenciranjem (A.1.5) po ξ u jediničnom elementu grupe (tj. za $\xi = 0$):

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{A.1.11}$$

Generatori A_i očigledno zadovoljavaju komutacione relacije:

$$[\ A_i, A_j\ ] = \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} A_k, \tag{A.1.12}$$

te su u bazisu $\{A_1, A_2, A_3\}$ strukturne konstante $c_{ij}^k = \epsilon_{ijk}$.

Zadatak A.1.9 Koristeći (A.1.10), odrediti Descartes-ove generatore za SU(2), i pokazati da i oni zadovoljavaju komutacione relacije (A.1.12). Na osnovu ovoga uporediti Lie-jeve algebre grupa SO(3, $\mathbb{R}$) i SU(2).

Za fiziku su od interesa ireducibilne reprezentacije ove algebre. U teoriji Lie-jevih algebri je razrađen algoritam njihove konstrukcije. Sam algoritam će, na jeziku jedva izmenjenom zbog fizičkog konteksta, biti izložen u sledećem odeljku, a osnovni elementi su dati u nastavku ovog paragrafa kroz zadatke. On bazira na razmatranju kompleksifikovane algebre su(2), a to je algebra sl(2, $\mathbb{C}$), za koju se pokazuje da je prosta (tj. da ne sadrži netrivijalne ideale). Ova činjenica omogućava primenu moćnog metoda konstrukcije ireducibilnih reprezentacija prostih algebri: odredi se standardna forma, tj. Cartan-Weyl-ov bazis, a zatim se razmatraju zajednički svojstveni vektori reprezenata Cartan-ove podalgebre. Njihove svojstvene vrednosti su težine, i najveća među njima karakteriše ireducibilnu reprezentaciju. Od značaja je i Kazimir-ov operator, čiji su svojstveni potprostori upravo ireducibilni potprostori algebre.

Zadatak A.1.10 * Za bazis $K_i = \imath A_i$ algebre sl(2, $\mathbb{C}$), pokazati da je $[\ K_i, K_j\ ] = \imath \sum_k \epsilon_{ijk} K_k$, i da je pridružena reprezentacija

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\imath \\ 0 & \imath & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{ad}(K_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \imath \\ 0 & 0 & 0 \\ -\imath & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{ad}(K_3) = \begin{pmatrix} 0 & \imath & 0 \\ -\imath & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Zadatak A.1.11 * Koristeći prethodni zadatak, uveriti se da je $g_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{Tr}\,\mathrm{ad}(K_i)\mathrm{ad}(K_j) = 2\delta_{ij}$ *Cartan-ov tenzor* algebre sl(2, $\mathbb{C}$). Odavde izvesti zaključak da je algebra poluprosta. Zatim, koristeći činjenicu da je dimenzija algebre 3, pokazati da je sl(2, $\mathbb{C}$) prosta algebra, i da joj je rang 1.

Zadatak A.1.12 * Birajući za jedini bazisni vektor Cartan-ove algebre (videti prethodni zadatak) K_3, pokazati da su $K_\pm \stackrel{\text{def}}{=} K_1 \pm \imath K_2$ koreni (tj. svojstveni za $\mathrm{ad}(K_3)$) vektori, za korenove (svojstvene vrednosti) ± 1.

Zadatak A.1.13 * Koristeći Z A.1.11, pokazati da je $C_2 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i,j=1}^{3} g_{ij} K_i K_j = 2\mathbf{K}^2$, gde je $\mathbf{K}^2 = K_1^2 + K_2^2 + K_3^2$, jedini *Kazimir-ov operator* algebre sl(2, $\mathbb{C}$). Pokazati da za svaku reprezentaciju $D(\mathrm{sl}(2, \mathbb{C}))$ i svaki element K algebre važi $[\ D(\mathbf{K}^2), D(K)\ ] = 0$ (ovde je $D(\mathbf{K}^2) = \sum_{i=1}^{3} D^2(K_i)$). Odavde zaključiti da je za ireducibilnu reprezentaciju, $D(\mathbf{K}^2)$ skalarni operator.

A.2 Angularni momenti i reprezentacije algebre su(2)

U ovom odeljku će kvantizacijom klasičnog angularnog momenta biti određene opservable angularnog momenta. Njihove komutacione relacije će biti iskorišćene za klasifikaciju prostora u kojima se ovakve opservable mogu konstruisati. Veza sa Lie-jevom algebrom grupe rotacija će omogućiti primenu tehnike standardne za Lie-jeve algebre pri rešavanju ovog problema.

A.2.1 Kvantizacija angularnih momenata

U glavama 5 i 6 je pokazano da su rotacije generisane angularnim momentima, i veza rotacija i angularnih momenata je data kako za klasičan, tako i za kvantni formalizam. Kvantizacijom klasičnog orbitnog angularnog momenta, $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, dobija se vektorska opservabla orbitnog angularnog momenta u jednočestičnom orbitnom prostoru $\mathcal{H}_o$, sa Descartes-ovim komponentama:

$$\hat{l}_i = \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{p}_k. \tag{A.2.1}$$

(kao i do sada, indeksi 1, 2 i 3 označavaju x-, y- i z-komponente vektorskih veličina, npr. $\hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$).

Bilo direktnom proverom iz prethodne jednakosti, a na osnovu poznatih komutatora $[\, \hat{r}_i, \hat{p}_j \,] = \imath\hbar\delta_{ij}$ koordinate i impulsa, bilo na osnovu Poisson-ovih zagrada klasične mehanike, lako je pokazati da opservable orbitnog angularnog momenta zadovoljavaju komutacione relacije:

$$[\, \hat{l}_i, \hat{l}_j \,] = \imath\hbar \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \hat{l}_k \tag{A.2.2}$$

(npr. $[\, \hat{l}_x, \hat{l}_y \,] = \hat{l}_z$).

Način na koji je opservabla $\hat{\mathbf{l}}$ uvedena, garantuje da je to vektorski operator u jednočestičnom prostoru stanja $\mathcal{H}_o$. No, i taj prostor je izgrađen (u § 2.6) na osnovu analize komutacionih relacija koordinata i impulsa, kao minimalni prostor u kome su te komutacione relacije zadovoljene za netrivijalne operatore[A.2.1]. Stoga se nameće pitanje nezavisne konstrukcije prostora u kojima je moguće naći opservable $\hat{K}_1$, $\hat{K}_2$ i $\hat{K}_3$, koje zadovoljavaju komutacione relacije tipa (A.2.2):

$$[\, \hat{K}_i, \hat{K}_j \,] = \imath\hbar \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \hat{K}_k. \tag{A.2.3}$$

Po analogiji, vektorska opservabla $\hat{\mathbf{K}}$ će i dalje biti nazivana angularni moment (ali bez odrednice orbitni); razmotreni uzor, orbitni angularni moment, očigledno je jedan specijalni slučaj. Odmah treba imati u vidu da ovakva generalizacija daje prostore i operatore koji ne moraju biti relirani sa $\mathcal{H}_o$, pa ni sa samim pojmom rotacija.

[A.2.1]Terminologijom teorije Lie-jevih grupa, $\mathcal{H}_o$ je prostor netrivijalne ireducibilne reprezentacije Heisenberg-ove algebre. Ona je razrešiva, pa su dimenzije njenih ireducibilnih reprezentacija 1 i ∞. Kod jednodimenzionalnih, svi elementi komutiraju, te nisu verne, i stoga ostaju beskonačnodimenzionalne.

A.2.2 Veza sa algebrom grupe rotacija

Komutatori (A.2.3) podsećaju na relacije (A.1.12) za Lie-jevu algebru su(2). U stvari, elementi A_i iz (A.1.12) pomnoženi konstantom $-\imath\hbar$ zadovoljavaju komutacione relacije (A.2.3): $[\,-\imath\hbar A_i, -\imath\hbar A_j\,] = \imath\hbar\sum_{k=1}^{3}\epsilon_{ijk}(-\imath\hbar A_k)$, tj. obe relacije određuju istu Lie-jevu algebru. Ako se još uoči da su matrice A_i kosohermitske, dok su operatori $\hat{K}_i$ opservable, jasno je da operatori $\hat{\mathbf{K}}$ čine bazis iste algebre, koji je, pošto su mu elementi hermitski operatori, nešto pogodniji za rad u fizici.

Posledica ovog opažanja je da se kvantizacija rotacija, odnosno angularnih momenata, svodi zapravo na nalaženje reprezentacija grupe SU(2) ili, ekvivalentno, algebre su(2). Drugim rečima, treba naći sve prostore u kojima je moguće realizovati operatore koji zadovoljavaju komutacione relacije (A.2.3), i naći ove realizacije. Teorem T A.1.1 svodi takvu klasifikaciju na konstrukciju ireducibilnih reprezentacija. Znajući njih, prostor proizvoljne reprezentacije se može razložiti na ortogonalni zbir ireducibilnih potprostora, i relevantni problemi rešavati u svakom od njih. Stoga će u nastavku biti konstruisane prvo ireducibilne reprezentacije, a zatim će biti razmotreno opisano razlaganje u opštem slučaju.

A.2.3 Konstrukcija ireducibilnih potprostora

Kao što je već napomenuto, različiti prostori u kojima se mogu realizovati operatori $\hat{\mathbf{K}}$ koji zadovoljavaju komutacione relacije (A.2.3) su zapravo prostori ireducibilnih reprezentacija algebre su(2). Stoga će biti nađeni standardnom procedurom za poluproste Lie-jeve algebre[A.2.2].

Neka je $\mathcal{V}^{(k)}$ jedan takav ireducibilni prostor. Precizno, $\mathcal{V}^{(k)}$ je prostor u kojem deluju tri opservable $\hat{\mathbf{K}}$, pri čemu:

(i) za opservable $\hat{\mathbf{K}}$ važi (A.2.3);

(ii) u $\mathcal{V}^{(k)}$ nema netrivijalnih zajedničkih invarijantnih potprostora za $\hat{\mathbf{K}}$.

Cilj je naći sve moguće prostore koji zadovoljavaju gornje zahteve, i u svakom od njih tačan oblik operatora $\hat{\mathbf{K}}$. Iz teorema T A.1.1 je jasno da je $\mathcal{V}^{(k)}$ konačne dimenzije.

Pogodno je uvesti pomoćne operatore *povišavanja*, i *snižavanja*, $\hat{K}_\pm \stackrel{\text{def}}{=} \hat{K}_1 \pm \imath\hat{K}_2$ (razlog za takve nazive će uskoro postati samoočigledan). Jasno je da ovi operatori sa svoje strane potpuno određuju operatore $\hat{K}_1$ i $\hat{K}_2$, relacijama $\hat{K}_1 = \frac{1}{2}(\hat{K}_+ + \hat{K}_-)$, odnosno $\hat{K}_2 = \frac{1}{2\imath}(\hat{K}_+ - \hat{K}_-)$. Stoga je prostor ireducibilan za $\hat{\mathbf{K}}$ ako i samo ako je ireducibilan za trojku operatora $\hat{K}_3$, $\hat{K}_+$ i $\hat{K}_-$. Konačno, jasno je da su $\hat{K}_+$ i $\hat{K}_-$ međusobni adjungovani (tj. $\hat{K}_\pm^\dagger = \hat{K}_\mp$), pa su proizvodi $\hat{K}_+\hat{K}_-$ i $\hat{K}_-\hat{K}_+$ opservable (pozitivne).

Lema A.2.1 *Važe sledeće komutacione relacije:*

$$[\,\hat{K}_3, \hat{K}_\pm\,] = \pm\hbar\hat{K}_\pm; \tag{A.2.4a}$$

$$[\,\hat{K}_+, \hat{K}_-\,] = 2\hbar\hat{K}_3; \tag{A.2.4b}$$

$$[\,\hat{K}_3, \hat{K}_+\hat{K}_-\,] = [\,\hat{K}_3, \hat{K}_-\hat{K}_+\,] = [\,\hat{K}_+\hat{K}_-, \hat{K}_-\hat{K}_+\,] = 0. \tag{A.2.4c}$$

[A.2.2] Ta procedura će biti izložena nezavisno, ne podrazumevajući predznanje iz teorije Lie-jevih algebri, u notaciji uobičajenoj za fizičku literaturu. No, čitalac će lako prepoznati standardnu formu, korenove i maksimalne težine.

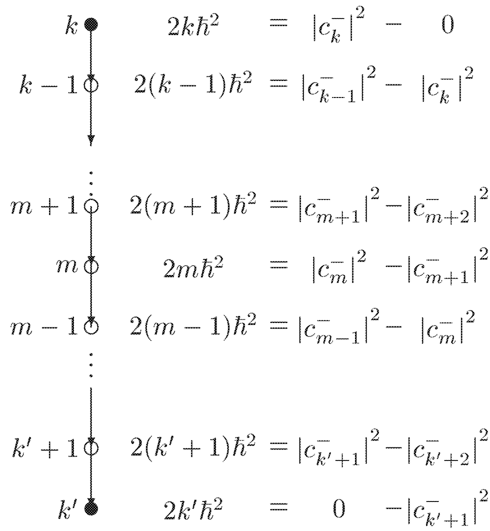
Dokaz: Na osnovu (A.2.3) i definicije $\hat{K}_\pm$ se lako pokazuju prva i druga jednakost, a odavde i treća. *Q. E. D.*

Iz poslednje jednakosti sledi da su operatori $\hat{K}_3$, $\hat{K}_+\hat{K}_-$ i $\hat{K}_-\hat{K}_+$ tri kompatibilne opservable, te postoji njihov zajednički svojstveni ortonormirani bazis, $\mid k,m,\gamma\,\rangle$ u prostoru u kojem deluju. Oznaka k u vektoru podseća na prostor $\mathcal{V}^{(k)}$, a m prebrojava različite svojstvene vrednosti operatora $\hat{K}_3$:

$$\hat{K}_3 \mid k,m,\gamma\,\rangle = m\hbar \mid k,m,\gamma\,\rangle; \tag{A.2.5}$$

konačno, γ je indeks koji, u slučaju da $\hat{K}_3$ nije kompletna opservabla prebrojava bazis u m-tom svojstvenom potprostoru[A.2.3]. Svojstvene vrednosti za preostala dva operatora su $\alpha^\pm_m(\gamma)$: $\hat{K}_\pm\hat{K}_\mp \mid k,m,\gamma\,\rangle = \alpha^\pm_m(\gamma) \mid k,m,\gamma\,\rangle$.

Lema A.2.2 *Vektori $\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\,\rangle$ su zajednički svojstveni vektori operatora $\hat{K}_3$, $\hat{K}_+\hat{K}_-$ i $\hat{K}_-\hat{K}_+$, a odgovarajuća svojstvena vrednost operatora $\hat{K}_3$ je $(m\pm1)\hbar$. Pri tome su za različite vrednosti γ vektori $\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\,\rangle$ međusobno ortogonalni.*



Slika A.3: **Standardni bazis $\mathcal{V}^{(k)}$.**

Dokaz: Niz jednakosti $\hat{K}_3(\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\,\rangle) = ([\,\hat{K}_3,\hat{K}_\pm\,] + \hat{K}_\pm\hat{K}_3) \mid k,m,\gamma\rangle = (\pm\hbar+m\hbar) \mid k,m,\gamma\rangle$ pokazuje da je $\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\rangle$ svojstveni vektor operatora $\hat{K}_3$ za svojstvenu vrednost $(m\pm1)\hbar$ (poslednja jednakost u nizu je posledica prve jedakosti iz leme L A.2.1). Slično, za ostale operatore se nalazi $\hat{K}_\pm\hat{K}_\mp(\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\,\rangle) = \alpha^\pm_m(\gamma)\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\,\rangle$, i $\hat{K}_\mp\hat{K}_\pm(\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\,\rangle) = ([\,\hat{K}_\mp,\hat{K}_\pm\,] + \hat{K}_\pm\hat{K}_\mp)(\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\,\rangle) = (\mp2\hbar\hat{K}_3 + \hat{K}_\pm\hat{K}_\mp)(\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\,\rangle) = (\mp2\hbar^2(m\pm1)+\alpha^\mp_m(\gamma))(\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\rangle)$. Ortogonalnost sledi iz jednakosti $(\langle k,m,\gamma' \mid \hat{K}^\dagger_\pm)(\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\rangle) = \langle k,m,\gamma' \mid \hat{K}_\mp\hat{K}_\pm \mid k,m,\gamma\rangle = \alpha^\mp_m\delta_{\gamma\gamma'}$. *Q. E. D.*

Lema pokazuje da operatori $\hat{K}_+$ i $\hat{K}_-$ preslikavaju svojstvene vektore operatora $\hat{K}_3$ u druge svojstvene vektore, povišujući, odnosno spuštajući svojstvene vrednosti za 1, i ne mešajući pri tome vektore sa različitim vrednostima γ. To znači da se sukcesivnim dejstvom na operatorima $\hat{K}_+$ i $\hat{K}_i$ na vektor $\mid k,m,\gamma\,\rangle$ za odabranu vrednost m, dobija niz vektora koji obrazuju invarijantni potprostor. Kako je $\mathcal{V}^{(k)}$ ireducibilan jasno je da ovo mora biti ceo prostor, tj. indeks γ je nepotreban, a $\hat{K}_3$ je kompletna opservabla u $\mathcal{V}^{(k)}$.

Teorem A.2.1 *Za svako $k = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ postoji po jedan ireducibilni prostor angularnog momenta dimenzije $2k+1$.* Standardni bazis *ovog prostora je skup vektora $\{\mid km\,\rangle \mid m = k, k-1, \dots, -k+1, -k\}$ za koje važi*

$$\hat{K}_3 \mid km\,\rangle = \hbar m \mid km\,\rangle, \quad \hat{K}_\pm \mid km\,\rangle = \hbar\sqrt{(k\mp m)(k\pm m+1)} \mid k,m\pm1\,\rangle. \tag{A.2.6}$$

Dokaz: Kako je $\hat{K}_3$ kompletna opservabla, njeni svojstveni vektori $\mid km\,\rangle$ su određeni do na fazni faktor. Ako je $\mid km\,\rangle$ jedan ortonormirani svojstveni bazis za $\hat{K}_3$, na osnovu prethodne leme $\hat{K}_\pm$ mora preslikati vektor $\mid km\,\rangle$ u vektor kolinearan sa $\mid k,m\pm1\,\rangle$, tj. $\hat{K}_\pm \mid km\,\rangle = c^\pm_m \mid k,m\pm1\,\rangle$. Konstante $c^\pm_m$ zadovoljavaju

[A.2.3] Pedantnija oznaka bi bila $\mid k,m,\gamma_m\,\rangle$, jer *a priori* degeneracija može zavisiti od m. Međutim, uobičajeno je da se ova zavisnost podrazumeva, a naglašava samo ako je to neophodno.

jednakost $c_m^+ = \langle k, m+1 \mid (\hat{K}_+ \mid km \rangle) = (\langle k, m+1 \mid \hat{K}_+) \mid km \rangle = c_{m+1}^{-*}$. Koristeći (A.2.4b) nalazi se $|c_m^-|^2 - |c_m^+|^2 = \|\hat{K}_- \mid km \rangle\|^2 - \|\hat{K}_+ \mid km \rangle\|^2 = \langle km \mid [\,\hat{K}_+, \hat{K}_-\,] \mid km \rangle = 2\hbar \langle km \mid \hat{K}_3 \mid km \rangle = 2\hbar^2 m$, tj.

$$2\hbar^2 m = |c_m^-|^2 - |c_{m+1}^-|^2, \quad \forall m. \tag{A.2.7}$$

Već ranije naglašavana konačnost dimenzije prostora $\mathcal{V}^{(k)}$ ima za posledicu da postoje maksimalna i minimalna vrednost indeksa m; neka su to $k = \max\{m\}$ i $k' = \min\{m\}$. To znači da je $\hat{K}_+ \mid k, m = k \rangle = 0$ i $\hat{K}_- \mid k, m = k' \rangle = 0$, tj. $c_k^+ = c_{k'}^- = 0$. Kako se iz $\mid k, m = k \rangle$ uzastopnim dejstvom operatora $\hat{K}_-$, smanjujući m za po 1, može dobiti vektor $\mid k, m = k' \rangle$, kao i ceo bazis prostora $\mathcal{V}^{(k)}$ sledi da ova maksimalna vrednost, k, jednoznačno određuje sam prostor (zato je ona i anticipirana kao oznaka prostora). Sumirajući jednakosti (A.2.7) po m u celom intervalu $[k', k]$, na desnoj strani se svi sabirci poništavaju (videti Crtež C A.3), pa se nalazi $2\hbar^2 \sum_{m=k'}^{k} m = 2\hbar^2 \sum_{m=0}^{k-k'} (k'+m) = 2\hbar^2 (k'(k-k'+1) + \frac{(k-k')(k-k'+1)}{2}) = \hbar^2 (k+k')(k-k'+1) = 0$. Odavde sledi (jer je $k \geq k'$, te je $k - k' + 1 > 0$) da je $k' = -k$. Konačno, pošto se sukcesivnim oduzimanjem broja 1 od k dolazi do $k' = -k$, jasno je da je k nenegativan ceo ili poluceo broj.
Na sličan način, sabirajući jednakosti (A.2.7) od k pa do nekog odabranog m, nalazi se $2\hbar^2 \sum_{i=m}^{k} i = 2\hbar^2 \sum_{i=0}^{k-m} (m+i) = 2\hbar^2 (m(k-m+1) + \frac{(k-m)(k-m+1)}{2}) = \hbar^2 (k+m)(k-m+1) = |c_m^-|^2$. Izborom realnog faznog faktora za same koeficijente c_m^-, uz nađene veze c_m^+ i c_m^-, dobija se ostatak tvrđenja teorema. *Q. E. D.*

Na osnovu prethodnog teorema i definicionih jednakosti za operatore $\hat{K}_\pm$, očigledno je da opservable angularnog momenta na vektore bazisa $\{\mid km \rangle \mid m = k, k-1, \dots, -k\}$ prostora $\mathcal{V}^{(k)}$ deluju na sledeći način:

$$\hat{K}_1 \mid km \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{(k-m)(k+m+1)} \mid k, m+1 \rangle + \frac{\hbar}{2} \sqrt{(k+m)(k-m+1)} \mid k, m-1 \rangle, \tag{A.2.8a}$$

$$\hat{K}_2 \mid km \rangle = \frac{\hbar}{2\imath} \sqrt{(k-m)(k+m+1)} \mid k, m+1 \rangle - \frac{\hbar}{2\imath} \sqrt{(k+m)(k-m+1)} \mid k, m-1 \rangle, \tag{A.2.8b}$$

$$\hat{K}_3 \mid km \rangle = \hbar m \mid km \rangle. \tag{A.2.8c}$$

Jasno je da je matrica koja reprezentuje operator $\hat{K}_3$ u standardnom bazisu dijagonalna, sa vrednostima $\hbar m$ $(m = k, \dots, -k)$ na dijagonali; matrice operatora $\hat{K}_1$ i $\hat{K}_2$ imaju nenulte elemente samo na dijagonalama ispod i iznad glavne, a njihove vrednosti su date gornjom jednakošću.

Zadatak A.2.1 Odrediti matrice operatora $\hat{\mathbf{K}}$, $\hat{K}_\pm$ i $\sum_i \hat{K}_i^2$ za $k = 0, \frac{1}{2}, 1$.

Konačno, eksponenciranjem ovako dobijenih operatora $\hat{\mathbf{K}}$, dobijaju se i operatori rotacija. Reprezentanti rotacija oko Descartes-ovih ortova $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ su operatori $\hat{D}^{(k)}(\varphi \mathbf{e}_i) = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\hat{K}_i}$. Na primer, u standardnom bazisu, rotacija za φ oko $\mathbf{e}_3$ se reprezentuje dijagonalnom matricom

$$D^{(k)}(\varphi \mathbf{e}_3) = \operatorname{diag}[e^{-\imath\varphi k}, e^{-\imath\varphi(k-1)}, \dots, e^{\imath\varphi(k-1)}, e^{\imath\varphi k}]. \tag{A.2.9}$$

Pri parametrizaciji Euler-ovim uglovima, reprezentanti se moraju množiti na isti način kao i elementi grupe, te (A.1.6) povlači $\hat{D}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{D}^{(k)}(\alpha \mathbf{e}_3) \hat{D}^{(k)}(\beta \mathbf{e}_1) \hat{D}^{(k)}(\gamma \mathbf{e}_3)$. Zbog dijagonalnosti $D^{(k)}(\varphi \mathbf{e}_3)$, matrični elementi operatora $\hat{D}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma)$ u standardnom bazisu su:

$$D_{mm'}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{\imath(m\gamma + m'\alpha)} \langle km \mid e^{\imath\beta \hat{K}_1^{(k)}} \mid km' \rangle. \tag{A.2.10}$$

To su tzv. *Wigner-ove* ili *uopštene sferne funkcije*, i može se pokazati[A.2.4] da je:

$$D^{(k)}_{pq}(\alpha,\beta,\gamma)=\sqrt{\frac{(k+p)!}{(k-p)!(k+q)!(k-q)!}}e^{\imath(p\gamma+q\alpha)}\cos^{-p-q}\frac{\beta}{2}\sin^{q-p}\frac{\beta}{2}P^k_{pq}\cos^{-p-q}\frac{\beta}{2}, \quad (A.2.11)$$

gde je $P^k_{pq}(t)\stackrel{\mathrm{def}}{=}\frac{\mathrm{d}^{k-p}}{\mathrm{d}t^{k-p}}(t^{k+q}(1-t)^{k-q})$. Očigledno je da se uz pomoć Wigner-ovih funkcija, dejstvo uopštene rotacije na standardni bazis se može predstaviti u formi

$$\hat{D}^{(k)}(\varphi\mathbf{u})\mid km\,\rangle=\sum_{m'=-k}^{k}D^{(k)}_{m'm}(\varphi\mathbf{u})\mid km'\,\rangle, \quad (A.2.12)$$

što je zapravo ekvivalentna alternativna definicija standardnog bazisa[A.2.5].

Jednakost (A.2.9) pokazuje da pri polucelom k operator rotacije za 2π oko $\mathbf{e}_3$ nije jedinični operator I već $-I$, tako da istoj rotaciji iz $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ (rotacija za ugao 0 i 2π su isti, jedinični element ove grupe) odgovaraju dva operatora suprotnog znaka, kao u grupi SU(2). To znači da ovi operatori daju dvoznačne reprezentacije grupe $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, a obične reprezentacije grupe SU(2). Kada je k celobrojno, dobijaju se prave reprezentacije obe grupe.

A.2.4 Kvadrat angularnog momenta i standardni bazis

Pomoću vektorske opservable angularnog momenta može se konstruisati opservabla *kvadrata angularnog momenta*:

$$\boxed{\hat{\mathbf{K}}^2=\sum_{i=1}^3\hat{K}_i}. \quad (A.2.13)$$

Kao što će se uskoro ispostaviti, ova opservabla ima značajnu ulogu u teoriji angularnog momenta, zahvaljujući lako proverljivoj kompatibilnosti sa svim komponentama angularnog momenta:

$$[\,\hat{\mathbf{K}}^2,\hat{K}_i\,]=0,\quad i=1,2,3. \quad (A.2.14)$$

Odavde sledi da su svojstveni potprostori $\hat{\mathbf{K}}^2$ invarijantni za sve operatore $\hat{K}_i$, tj. da sadrže cele ireducibilne prostore angularnog momenta. Specijalno, to znači da u jednom ireducibilnom prostoru $\mathcal{V}^{(k)}$ operator $\hat{\mathbf{K}}^2$ deluje kao skalarni operator, tj. jedinični operator pomnožen konstantom (realnom, jer je to svojstvena vrednost za $\hat{\mathbf{K}}^2$). Precizno, iz (A.2.13) sledi da je $\hat{\mathbf{K}}^2=\frac{1}{2}(\hat{K}_+\hat{K}_-+\hat{K}_-\hat{K}_+)+\hat{K}_3^2$. Stoga je $\hat{\mathbf{K}}^2\mid km\,\rangle=\frac{1}{2}((c^-_m)^2+(c^+_m)^2)+m^2\hbar^2$, tj.

$$\boxed{\hat{\mathbf{K}}^2\mid km\,\rangle=k(k+1)\hbar^2\mid km\,\rangle}. \quad (A.2.15)$$

Vidi se, kao što je i anticipirano, da na sve vektore standardnog bazisa, samim tim i na sve vektore iz $\mathcal{V}^{(k)}$, $\hat{\mathbf{K}}^2$ deluje tako što ih množi skalarom $k(k+1)\hbar^2$.

Treba zapaziti da vrednost izraza $k(k+1)$ jednoznačno određuje i sam argument k, tj. $k(k+1)$ je na intervalu $[0,\infty)$ obostrano jednoznačna. To znači da svojstvena vrednost operatora $\hat{\mathbf{K}}^2$ jednoznačno određuje[A.2.6] ireducibilni prostor $\mathcal{V}^{(k)}$.

[A.2.4] Sledeći izraz je dat u knjizi Желобенко Д., Штерн А., *Представления Групп Ли* (Наука, Москва 1983). Drugi oblik istog izraza je detaljno izveden u knjizi Ф. И. Федоров, *Группа Лоренца*, Наука, Москва 1979.

[A.2.5] Definicija (A.2.6) je uobičajena u kontekstu teorije Lie-jevih algebri, dok se u nešto opštijem kontekstu teorije grupa (ne samo Lie-jevih) uvodi definicija (A.2.12).

[A.2.6] Na jeziku Lie-jevih algebri ovo znači da je $\hat{\mathbf{K}}^2$ Casimir-ov operator algebre ranga 1.

A.2.5 Standardni bazis u opštem slučaju

Do sada su bili razmatrani prostori $\mathcal{V}^{(k)}$ ireducibilni za vektorsku opservablu $\hat{\mathbf{K}}$ angularnog momenta. Teorem T A.1.1 garantuje da se svaki prostor $\mathcal{H}$, pri zadatim operatorima $\hat{\mathbf{K}}$ koji zadovoljavaju komutacione relacije (A.2.3), razlaže na ortogonalni zbir potprostora $\mathcal{V}^{(k)}$ ireducibilnih za ove operatore. Pri tome se svaki od ireducibilnih potprostora može javiti više puta. Neka je d_k broj pojavljivanja k-tog ireducibilnog potprostora u $\mathcal{H}$ (jasno, za neke vrednosti k može biti i $d_k = 0$, tj. $\mathcal{H}$ ne mora sadržati sve ireducibilne potprostore); ovi ireducibilni potprostori su označeni[A.2.7] sa $\mathcal{H}^{(k,\lambda)}$ $\lambda = 1, \dots, d_k$ (svaki $\mathcal{H}^{(k,\lambda)}$ je izomorfan sa $\mathcal{V}^{(k)}$). Ako $\mathcal{H}^{(k)}$ zbir k-tih ireducibilnih prostora, $\mathcal{H}^{(k)} \stackrel{\text{def}}{=} \oplus_{\lambda=1}^{d_k} \mathcal{H}^{(k,\lambda)}$, onda je razlaganje celog prostora

$$\mathcal{H} = \oplus_{k=0,\frac{1}{2},\dots} \mathcal{H}^{(k)} = \oplus_{k=0,\frac{1}{2},\dots} \oplus_{\lambda=1}^{d_k} \mathcal{H}^{(k,\lambda)}.$$

Znajući ovo, jasno je da je u $\mathcal{H}$ moguće naći standardni bazis

$$\boxed{\{\mid km\lambda\,\rangle \mid k = 0, \tfrac{1}{2}, \dots;\ m = k, \dots, -k;\ \lambda = 1, \dots, d_k\}}, \tag{A.2.16}$$

sastavljen od standardnih bazisa ireducibilnih potprostora $\mathcal{H}^{(k\lambda)}$ (pri fiksiranim vrednostima k i λ).

U tom bazisu je dejstvo operatora angularnog momenta suštinski dato relacijama (A.2.8) i (A.2.15):

$$\hat{K}_1 \mid km\lambda\,\rangle = \frac{\hbar}{2}(\sqrt{(k-m)(k+m+1)} \mid k, m+1, \lambda\,\rangle + \sqrt{(k+m)(k-m+1)} \mid k, m-1, \lambda\,\rangle), \tag{A.2.17a}$$

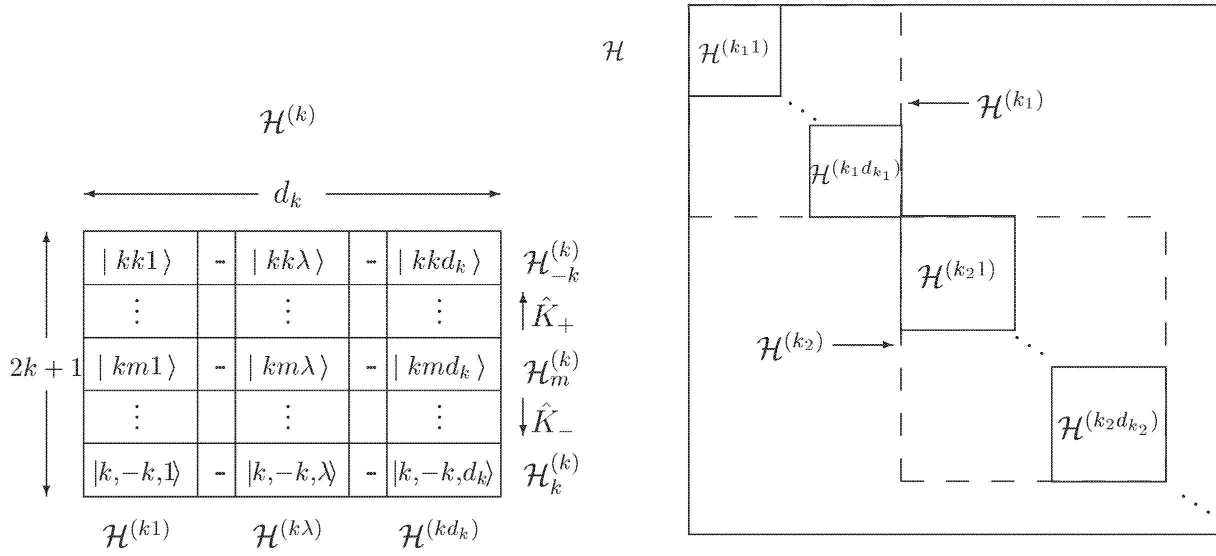
$$\hat{K}_2 \mid km\lambda\,\rangle = \frac{\hbar}{2\imath}(\sqrt{(k-m)(k+m+1)} \mid k, m+1, \lambda\,\rangle - \sqrt{(k+m)(k-m+1)} \mid k, m-1, \lambda\,\rangle), \tag{A.2.17b}$$

$$\boxed{\hat{K}_3 \mid km, \lambda\,\rangle = \hbar m \mid km, \lambda\,\rangle,\ \hat{\mathbf{K}}^2 \mid km\,\rangle = k(k+1)\hbar^2 \mid km\,\rangle}. \tag{A.2.18}$$

Stoga je određivanje ovakvog bazisa u $\mathcal{H}$ zapravo ekvivalentno razlaganju prostora na ireducibilne potprostore, i samim tim značajno kako zbog konceptualnih razloga, tako i zbog tehničkih pogodnosti.

Uobičajeni algoritam nalaženja standardnog bazisa direktno sledi iz opisanih svojstava operatora $\hat{\mathbf{K}}$ i $\hat{\mathbf{K}}^2$. Naime, pošto svojstvene vrednosti operatora $\hat{\mathbf{K}}^2$ obostrano jednoznačno određuju tip ireducibilnog potprostora, tj. broj k, potprostor $\mathcal{H}^{(k)}$ je tačno svojstveni potprostor operatora $\hat{\mathbf{K}}^2$ za svojstvenu vrednost $k(k+1)\hbar^2$ (u (A.2.18) se ovo manifestuje tako što dejstvo $\hat{\mathbf{K}}^2$ na vektore standardnog bazisa ne zavisi od m i λ). Čestim žargonom se ovaj višestruki (precizno d_k-struki) ireducibilni potprostor naziva "ormar sa fiokama" (Crtež C A.4). Sa druge strane, komutacione relacije (A.2.14) obezbeđuju da se sve opservable $\hat{\mathbf{K}}$ redukuju u ormaru (jer su svojstveni potprostori neke opservable istovremeno invarijantni potprostori za sve kompatibilne opservable). Pošto komponente angularnog momenta nisu međusobno kompatibilne, bira se jedna od njih, i to po konvenciji $\hat{K}_3$, za dopunu opservable $\hat{\mathbf{K}}^2$. Na osnovu prethodnih razmatranja, $\hat{K}_3$ je kompletna u svakom ireducibilnom prostoru $\mathcal{H}^{(k\lambda)}$, i pri tome podjednako deluje u svakom od njih (što se u (A.2.18) manifestuje kao nezavisnost od k i λ delovanja $\hat{K}_3$ na vektore standardnog bazisa; unutar ormara je k fiksirano, tako da ostaje nezavisnost od λ). Stoga su

[A.2.7] I ovde je primenjena konvencija objašnjena u A.2.5. Precizno pisanje bi zahtevalo $\mathcal{H}^{(k,\lambda_k)}$.



Slika A.4: **Standardni bazis.** *Levi pravougaonik je $\mathcal{H}^{(k)}$: njegova m-ta vrsta je $\mathcal{H}^{(k)}_m$, kolona λ je ireducibilni potprostor $\mathcal{H}^{(k\lambda)}$, a njihov presek je jednodimenzionalni potprostor razapet vektorom $|\,km\lambda\,\rangle$. Na desnoj strani je celokupni prostor $\mathcal{H}$ koji se razlaže na potprostore $\mathcal{H}^{(k)}$ (isprekidani kvadrati), a ovi na po d_k ireducibilnih potprostora $\mathcal{H}^{k\lambda)}$. Istovremeno, desna slika je i kvazidijagonalni matrični oblik operatora angularnog momenta u standardnom bazisu.*

svojstveni potprostori za $\hat{K}_3$ u $\mathcal{H}^{(k)}$ d_k-struko degenerisani, tj. za svako $m = k, \ldots, -k$ jedan d_k-dimenzionalni potprostor $\mathcal{H}^{(k)}_m$ prostora $\mathcal{H}^{(k)}$ je svojstveni potprostor za $\hat{K}_3$. Ovaj potprostor, tzv. "fioka ormara" je očigledno zajednički svojstveni potprostor opservabli $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_3$ u $\mathcal{H}$, za svojstvene vrednosti $k(k+1)\hbar^2$ i $m\hbar$, respektivno. Konačno, izborom jednog bazisa u jednoj od fioka, npr. $\mathcal{H}^{(k)}_{\overline{m}}$, tj. izborom $\{|\,k\overline{m}\lambda\,\rangle \mid \lambda = 1, \ldots, d_k\}$, određuju se i bazisi u ostalim fiokama spuštanjem i podizanjem vrednosti $\overline{m}$, tj. uzastopnim dejstvom operatorima $\hat{K}_\pm$ na $|\,k\overline{m}\lambda\rangle$, na osnovu relacija (A.2.6) koje sada postaju

$$|\,k, m \pm 1, \lambda\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\hbar\sqrt{(k \mp m)(k \pm m + 1)}} \hat{K}_\pm \,|\,km\lambda\rangle, \quad \lambda = 1, \ldots, d_k. \tag{A.2.19}$$

Jasno je da se za fiksirano λ dobija standardni bazis jednog ireducibilnog potprostora, $\mathcal{H}^{(k\lambda)}$ ("krilo ormara" na Crtežu C A.4).

Na taj način se algoritam nalaženja standardnog bazisa sastoji iz tri koraka:

i) Rešavanje zajedničkog svojstvenog problema (A.2.18) za $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_3$, čime se dobijaju ormari i fioke;

ii) izbor jedne fioke $\mathcal{H}^{(k)}_m$ i bazisa $|\,km\lambda\,\rangle$ u njoj;

iii) formiranje celog standardnog bazisa u $\mathcal{H}^{(k)}$, time (ponavljanjem procedure za svako k za koje je $d_k \geq 1$) i u $\mathcal{H}$, dejstvom operatorima $\hat{K}_\pm$ na vektore odabrane u prethodnom koraku.

Treba obratiti pažnju na proizvoljnost u koraku ii) opisanog algoritma: bazis fioke nije *a priori* određen. Ovakve proizvoljnosti se obično rešavaju kompletiranjem skupa kompatibilnih opservabli, kao što će biti opisano u sledećem paragrafu.

U standardnom bazisu, operatori $\hat{\mathbf{K}}$ i $\hat{\mathbf{K}}^2$ imaju kvazidijagonalnu formu, pri čemu blokovi na dijagonali odgovaraju ireducibilnim potprostorima $\mathcal{H}^{(k,\lambda)}$, a za isto k i različite vrednosti λ odgovarajućih d_k blokova je jednako (specijalno kod operatora $\hat{K}_3$ i $\hat{\mathbf{K}}^2$ i sami blokovi su dijagonalni).

A.2.6 Tenzorski operatori

Ako je u prostoru stanja $\mathcal{H}$ zadat nesingularni operator $\hat{B}$, onda je time zadat i operator u prostoru svih operatora u $\mathcal{H}$, tj. superoperator, čije je dejstvo na proizvoljni operator $\hat{A}$: $\hat{\hat{B}}\hat{A} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{B}\hat{A}\hat{B}^{-1}$. Ovo je generalizacija veze među operatorima i superoperatorima koji se dobijaju pri kvantizaciji Galilejeve grupe[A.2.8] (glava 5). Stoga se superoperatori opštih rotacija mogu dobiti nevezano sa Galilejevom grupom, tj. i u slučaju opštih rotacija. Dakle, uvek kada je u $\mathcal{H}$ zadata reprezentacija grupe SU(2), i u prostoru operatora je zadata jedna reprezentacija iste grupe. Dobijeni operatori takođe čine reprezentaciju grupe SU(2), te se i u prostoru operatora može ponoviti ista procedura razlaganja i određivanja standardnog bazisa, kao i u prostoru stanja $\mathcal{H}$.

Odgovarajući standardni bazis operatora se označava sa $\hat{T}_m^{(k\lambda)}$. Međutim, indeks λ je suštinski nepotreban, jer se, za razliku od vektora stanja, kada se obično traži njihova potpuna klasifikacija, tj. bazis, za operatore unapred zna koji se razmatraju u datom fizičkom problemu, tako da pitanje bazisa u operatorskom prostoru nema praktične važnosti. Stoga u nastavku ovaj indeks neće biti pisan, i smatraće se da je zapravo sadržan u slovnoj oznaci operatora (npr. $\hat{A}_m^{(k)}$ i $\hat{B}_m^{(k)}$ su iz različitih ireducibilnih potprostora istog tipa). Skup operatora $\{\hat{T}_m^{(k)} \mid m = k, \ldots, -k\}$ obrazuje jedan ireducibilni prostor, koji se naziva *ireducibilni tenzorski potprostor*, dok se pojedini operatori $\hat{T}_m^{(k)}$ nazivaju *komponente ireducibilnog tenzorskog operatora*. Jasno je po definiciji, da se pri dejstvu rotacija komponente $\hat{T}_m^{(k)}$ transformišu kao i vektori standardnog bazisa (A.2.12):

$$\hat{U}(\varphi\mathbf{u})\hat{T}_m^{(k)}\hat{U}^{-1} = \sum_{m=-k}^{k} U_{m'm}^{(k)}(\varphi\mathbf{u})\hat{T}_{m'}^{(k)}, \tag{A.2.20}$$

gde su $U_{m'm}^{(k)}(\varphi\mathbf{u})$ Wigner-ove funkcije. Razmatrajući rotacije oko Descartes-ovih ortova i diferencirajući levu stranu prethodne jednakosti, dobijaju se komutatori sa opservablama $\hat{\mathbf{K}}$. No, ti izrazi su zapravo komponente angularnih momenata u prostoru operatora, pa na desnoj strani mora biti analogon od (A.2.6):

$$[\,\hat{K}_3, \hat{T}_m^{(k)}\,] = m\hbar\hat{T}_m^{(k)}, \quad [\,\hat{K}_\pm, \hat{T}_m^{(k)}\,] = \sqrt{(k \mp m)(k \pm m + 1)}\hbar\hat{T}_{m\pm1}^{(k)}. \tag{A.2.21}$$

Ovo je takođe moguća alternativna definicija komponenti ireducibilnog tenzorskog operatora (uporediti sa primedbom A.2.5). Jasno je da operator komutira sa $\hat{\mathbf{K}}$ ako i samo ako je ireducibilni

[A.2.8] U poređenju sa odgovarajućim izrazima iz glave 5, u poslednjem izrazu su izmenjena mesta operatorima $\hat{B}$ i $\hat{B}^{-1}$. U stvari, gornji izraz je formalna definicija jednog superoperatora, nezavisna od mogućih fizičkih interpretacija, dok su superoperatori razmatrani u glavi 5 imali tačno određenu, pasivnu, interpretaciju dejstva Galilejevih transformacija u prostoru operatora.

tenzorski operator sa $k = 0$ (samim tim i $m = 0$); takvi operatori se nazivaju *skalarni operatori*. Za $k = 1$ se dobija trojka operatora $\{\hat{T}^{(1)}_1, \hat{T}^{(1)}_0, \hat{T}^{(1)}_{-1}\}$, i to je tzv. *vektorski operator*. Nije teško proveriti da sami operatori angularnog momenta obrazuju jedan vektorski operator: uz pomoć leme L A.2.1 se nalazi da operatori $\hat{T}^{(1)}_0 = \hat{K}_3$ i $\hat{T}^{(1)}_{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{1}{2}}\hat{K}_\pm$ zadovoljavaju (A.2.21).

Kako je u prostoru operatora moguće naći bazis čiji su elementi komponente ireducibilnih tenzorskih operatora, svaki operator se može napisati kao linearna kombinacija ireducibilnih tenzorskih operatora. Sa druge strane u prostoru stanja $\mathcal{H}$ je već ranije određen standardni bazis. Stoga je bilo koji matrični element $\langle \psi \mid \hat{A} \mid \chi \rangle$ moguće napisati kao linearnu kombinaciju matričnih elemenata $\langle k_2 m_2 \lambda_2 \mid \hat{T}^{(k)}_m \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle$. Prema tome, pomoću ovih "standardnih" matričnih elemenata moguće je izraziti sve verovatnoće prelaza, tj. osnovne eksperimentalno opservabilne veličine. Očigledni konceptualni značaj ovog rezultata pojačava sledeći

Teorem A.2.2 (Wigner, Eckart) *Matrični element $\langle k_2 m_2 \lambda_2 \mid \hat{T}^{(k)}_m \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle$ se može izraziti u formi*

$$\boxed{\langle k m \lambda \mid \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle = (\, k_1 m_1 ; k_2 m_2 \mid k m) \langle\, k \lambda \, \| T^{(k_2)} \| \, k_1 \lambda_1 \,\rangle}, \tag{A.2.22}$$

gde je $\langle k\lambda \mid |T^{(k_2)}| \mid k_1\lambda_1 \rangle$ tzv. redukovani matrični element *nezavisan od m, m_1 i m_2, dok je $(\, k_1 m_1 ; k_2 m_2 \mid k m)$* Clebsch-Gordan-ov koeficijent[A.2.9]*:*

$$\langle\, k_1 k_2 m_1 m_2 \mid k m \rangle = \delta_{m_1+m_2,m} \sqrt{\frac{(2k+1)(k_1+k_2-k)!(k_1-k_2+k)!(k_2-k_1+k)!}{(k_1+k_2+k+1)!}} \times \tag{A.2.23}$$

$$\frac{\sqrt{(k_1+m_1)!(k_1-m_1)!(k_2+m_2)!(k_2-m_2)!(k+m)!(k-m)!}}{\sum_z (-1)^z [z!(k_1+k_2-k-z)!(k_1-m_1-z)!(k_2+m_2-z)!(k-k_2+m_1+z)!(k-k_1-m_2+z)!}$$

(z prelazi skup svih vrednosti za koje su sabirci u sumi konačni).

Dokaz (dat u paragrafu § 7.4.7) bazira na uočavanju da je vektor $\hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle$ iz prostora u kome deluje reprezentacija $\hat{D}^{(k_2)} \otimes \hat{D}^{(k_1)}$. Ona nije ireducibilna, i samo ako sadrži reprezentaciju $\hat{D}^{(k)}$ matrični element nije nulti. Ovakvo razlaganje se detaljnije razmatra u § A.4.

Wigner-Eckart-ov teorem pokazuje da se svaki od $(2k+1)(2k_1+1)(2k_2+1)$ matričnih elemenata $\langle k m \lambda \mid \hat{T}^{(k_2)}_{m_2} \mid k_1 m_1 \lambda_1 \rangle$ (pri fiksiranim k, k_1, k_2, λ_1 i λ_2 i različitim m_1, m_2 i m) izražava kao proizvod jednog istog faktora (redukovani matrični element ne zavisi od m_1, m_2 i m) i odgovarajućih Clebsch-Gordan-ovih koeficijenata. Kako su Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti zadati kao funkcije kvantnih brojeva k_1, k_2, k, m_1, m_2 i m, oni ne zavise od prirode problema koji se razmatra (npr. fizičkog smisla operatora $\hat{T}^{(k)}_m$), niti od brojeva λ_1 i λ.

U slučaju skalarnog operatora, tj. operatora $\hat{A} = \hat{A}^{(0)}_0$ koji komutira sa $\hat{\mathbf{K}}$, pa stoga i sa $\hat{\mathbf{K}}^2$, on se mora redukovati u zajedničkim svojstvenim potprostorima za $\hat{\mathbf{K}}^2$ i $\hat{K}_3$, tj. u "fiokama" $\mathcal{H}^{(k)}_m$. Stoga, ako je $\hat{A}$ opservabla, u $\mathcal{H}^{(k)}_m$ mora postojati njen svojstveni podbazis, npr. $\mid k m a \lambda_a \rangle$: $\hat{A} \mid k m a \lambda_a \rangle = a \mid k m a \lambda_a \rangle$. No tada je, $\hat{A}(\hat{K}_\pm \mid k m a \lambda_a \rangle) = \hat{K}_\pm \hat{A} \mid k m a \lambda_a \rangle = a(\hat{K}_\pm \mid k m a \lambda_a \rangle)$, tj. i $\hat{K}_\pm \mid k m a \lambda_a \rangle$ je svojstveni vektor za $\hat{A}$ za istu svojstvenu vrednost a. Na taj način je pokazano da je u svakom potprostoru $\mathcal{H}^{(k\lambda)}$ operator $\hat{A}$ redukovan u konstantni operator

[A.2.9] Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti su nešto detaljnije razmatrani u paragrafu § A.4.2.

$a\hat{I}_{2k+1}$. U standardnom bazisu on ima dijagonalni oblik, pri čemu je svaki ireducibilni potprostor karakterisan istom svojstvenom vrednošću na dijagonali. Nije teško pokazati da se do istog zaključka dolazi i iz Wigner-Eckart-ovog teorema, za $k_2 = 0$. Ovaj rezultat se koristi kao dopuna algoritma nalaženja standardnog bazisa: u fizičkim problemima se obično javlja neka opservabla kompatibilna sa $\hat{\mathbf{K}}$ (npr. hamiltonijan kod sferno simetričnih sistema), a u fiokama $\mathcal{H}_m^{(k)}$ je kompletna opservabla; zato se u koraku ii) biraju njeni svojstveni vektori za standardni bazis, a njene svojstvene vrednosti preuzimaju ulogu kvantnog broja λ.

A.3 Orbitalni angularni moment

Opšti rezultati dobijeni u prethodnom odeljku će sada biti primenjeni na osnovnu realizaciju angularnog momenta, odnosno na orbitni angularni moment jedne trodimenzionalne čestice.

A.3.1 Prostor funkcija na sferi

Pri razmatranju kretanja jedne čestice u trodimenzionalnom prostoru, kao što je već ranije opisano u glavi 2, odgovarajući prostor stanja je orbitalni prostor $\mathcal{H}_o$, koji u koordinatnoj reprezentaciji postaje Lebesgue-ov prostor $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$. Dejstvo grupe rotacija u ovom prostoru je nađeno u glavi 5:

$$\hat{D}(R)f(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} f(R^{-1}\mathbf{r}), \tag{A.3.1}$$

gde $\hat{D}(R)$ operator koji reprezentuje rotaciju R.

Generatori rotacija oko koordinatnih osa se mogu naći direktno iz prethodne relacije, ili kvantovanjem odgovarajućih varijabli klasične mehanike, kao u § A.2.1; to su orbitalni angularni momenti[A.3.1]:

$$\hat{K}_i = -\imath\hbar \sum_{jk=1}^{3} \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}. \tag{A.3.2}$$

Zadatak A.3.1 Izvesti (A.3.2) direktno iz (A.3.1).

Ako se u (A.3.1) iskoriste sferne koordinate, koordinata r se ne menja: $\hat{D}(R)f(r,\theta,\varphi) = f(r,\theta',\varphi')$. Stoga je pogodno razmatrati $\mathcal{L}^2(\mathbf{r})$ kao potprostor u $\mathcal{L}^2(r) \otimes \mathcal{L}^2(\Omega)$ onih funkcija $f(r,\theta,\varphi)$ za koje je $f(0,\theta,\varphi)$ konstanta (ovo je očigledan uslov uzrokovan singularnošću sfernih koordinata u $r=0$). Jasno je da je ugaoni faktor prostor $\mathcal{L}^2(\Omega) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}^2(\theta,\varphi)$ zapravo Lebesgue-ov *prostor funkcija na sferi*. Pri tome se faktorišu i operatori rotacija i angularnih momenata: $\hat{D}(R) = I_r \otimes [\hat{D}(R)]_\Omega$, $\hat{\mathbf{l}} = I_r \otimes [\hat{\mathbf{l}}]_\Omega$. Vidi se da je dejstvo ovih operatora netrivijalno samo u $\mathcal{L}^2(\Omega)$, i svojstva ovih operatora su efektivno određena faktorom iz $\mathcal{L}^2(\Omega)$. Zato će u nastavku samo ovaj prostor biti razmatran, a indeks Ω će biti izostavljen (ali podrazumevan).

Jednakosti (A.3.2) u sfernim koordinatama postaju

$$\hat{l}_1 = \imath\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}), \quad \hat{l}_2 = -\imath\hbar(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}), \tag{A.3.3a}$$

[A.3.1]Kao i do sada, podrazumeva se $\hat{K}_i = \hat{D}(K_i)$.

$$\boxed{\hat{l}_3 = -\imath\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}}, \tag{A.3.3b}$$

a odavde se lako nalazi i kvadrat angularnog momenta:

$$\boxed{\hat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})]}. \tag{A.3.4}$$

Zadatak A.3.2 Izvesti relacije (A.3.3) i (A.3.4).

Singularnost sfernih koordinata u polovima sfere $\theta = 0, \pi$ povlači da u ovim tačkama funkcija na sferi $\psi(\theta, \varphi)$ za $\theta = 0, \pi$ ne sme zavisiti od φ, tj. $\psi(0, \varphi)$ i $\psi(\pi, \varphi)$ su konstante. Stoga se u $\mathcal{L}^2(\theta) \otimes \mathcal{L}^2(\varphi)$ izdvaja $\mathcal{L}^2(\Omega)$ kao potprostor funkcija potčinjenih gornjem graničnom uslovu. Takođe, zbog definicije sfernih koordinata, za svaku funkciju na sferi važi $\psi(\varphi, \theta) = \psi(\varphi + 2\pi, \theta)$. Na taj način moguće je razmatrati operatore angularnog momenta u većem prostoru, $\mathcal{L}^2(\theta) \otimes \mathcal{L}^2(\varphi)$, a naknadnom analizom rezultati se svode na $\mathcal{L}^2(\Omega)$. Prostor $\mathcal{L}^2(\varphi)$ je skup funkcija na kružnici, tj. funkcija koje zadovoljavaju $h(0) = h(2\pi)$, ili ekvivalentno, skup periodičnih funkcija na $\mathbb{R}$ sa periodom 2π. Proširujući operatore $\hat{l}_3$ i $\hat{\mathbf{l}}^2$ na prostor $\mathcal{L}^2(\theta) \otimes \mathcal{L}^2(\varphi)$, oni dobijaju formu

$$\hat{l}_3 = I_\theta \otimes [\hat{l}_3]_\varphi, \quad \hat{\mathbf{l}}^2 = [\frac{1}{\sin^2\theta}]_\theta \otimes [\hat{l}_3]^2_\varphi + -[\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}]_\theta \otimes I_\varphi, \tag{A.3.5}$$

gde je $[\hat{l}_3]_\varphi = -\imath\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$.

A.3.2 Sferni harmonici

Na taj način je određen prostor $\mathcal{L}^2(\Omega)$ relevantan za opis orbitnog angularnog momenta jedne čestice, i operatori koji reprezentuju angularni moment u njemu. U skladu sa rezultatima paragrafa § A.2.6, potrebno je rešiti zajednički svojstveni problem (A.2.18) za operatore (A.3.3b) i (A.3.4), da bi se dobio standardni bazis, u kome svi operatori imaju poznatu formu. Alternativno, može se rešavati zajednički svojstveni problem operatora (A.3.5) uz nametanje pomenutih graničnih uslova u polovima sfere. Da bi se izbegao sistem parcijalnih diferencijalnih jednačina u prvom pristupu, razmotrena će biti druga mogućnost.

Naime, u prostoru $\mathcal{L}^2(\theta)\otimes\mathcal{L}^2(\varphi)$ moguće je razdvojiti promenljive na osnovu sledećeg očiglednog rezultata.

Teorem A.3.1 (O razdvajanju promenljivih) *Neka je prostor $\mathcal{H}$ proizvod $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Neka su dalje $\hat{B}_i$ i $\hat{C}_i$ ($i = 1, 2$) opservable (u odgovarajućim faktor prostorima) sa spektrima $\beta^i = \{b^i\}$, odnosno $\gamma^i = \{c^i\}$, dok je $\{| b^i, \lambda^i(b^i) \rangle | b^i \in \beta^i;\ \lambda^i(b^i)\}$ svojstveni bazis za $\hat{B}_i$.*

i) Spektar opservable $\hat{A} = \hat{B}_1 \otimes \hat{B}_2$ je $\{b^1 b^2 \mid b^1 \in \beta^1, b^2 \in \beta^2\}$, a svojstveni bazis $| b^1, \lambda_{b^1} \rangle \otimes | b^2, \lambda_{b^2} \rangle$.

ii) Neka je $\hat{A} = \hat{B}_1 \otimes \hat{B}_2 + \hat{C}_1 \otimes \hat{C}_2$, pri čemu su opservable $\hat{B}_2$ i $\hat{C}_2$ kompatibilne, sa zajedničkim svojstvenim potprostorima $\mathcal{H}_2^{(b^2,c^2)}$. Tada je $\mathcal{H} = \oplus_{b^2,c^2}\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2^{(b^2,c^2)}$ ortogonalna dekompozicija prostora $\mathcal{H}$ na invarijantne potprostore opservable $\hat{A}$, a u svakom od njih $\hat{A}$ se redukuje u opservablu $\hat{A}^{(b^2,c^2)} = (b^2\hat{B}_1 + c^2\hat{C}_1) \otimes I^{(b^2,c^2)}$.

Drugi deo teorema daje algoritam za rešavanje svojstvenog problema operatora $\hat{A}$. Za svaki par kompatibilnih svojstvenih vrednosti operatora $\hat{B}_2$ i $\hat{C}_2$, u potprostoru $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2^{(b^2,c^2)}$ se rešava svojstveni problem redukovane opservable $\hat{A}^{(b^2,c^2)}$. Ako je $\mid a^{(b^2,c^2)}, \lambda_{a^{(b^2,c^2)}} \rangle$ svojstveni bazis operatora $b^2\hat{B}_1+c^2\hat{C}_1$ u $\mathcal{H}_1$, na osnovu prvog dela teorema (uzimajući $\hat{B}_2 = \hat{I}_2$ i $\hat{B}^1 = b^2\hat{B}_1+c^2\hat{C}_1$) svojstveni bazis operatora $\hat{A}^{(b^2,c^2)}$ u $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2^{(b^2,c^2)}$ je $\mid a^{(b^2,c^2)}, \kappa_{a^{(b^2,c^2)}} \rangle \otimes \mid b^2, c^2, \chi_{b^2,c^2} \rangle$. Stoga se svojstveni problem za $\hat{A}$ rešava tako da se reši zajednički svojstveni problem za $\hat{B}_2$ i $\hat{C}_2$, formiraju odgovarajući zajednički svojstveni potprostori $\mathcal{H}_2^{(b^2,c^2)}$ ovih operatora u $\mathcal{H}_2$ (sa bazisom $\mid b^2, c^2, \chi_{b^2,c^2} \rangle$); kada se za svaki od njih reši svojstveni problem operatora $b^2\hat{B}_1 + c^2\hat{C}_1$ u $\mathcal{H}_1$, dobija se ceo svojstveni bazis za $\hat{A}$. Očigledno, spektar mu je $\{a^{(b^2,c^2)} \mid \forall b_2, c_2\}$.

Sada se može pristupiti direktnom rešavanju zajedničkog svojstvenog problema $\hat{l}_3$ i $\hat{\mathbf{l}}^2$. U $\mathcal{H}_\varphi$ dobija se za $[\hat{l}_3]_\varphi$ svojstvena jednačina $-\imath\hbar\frac{\mathrm{d}h(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi} = m\hbar h(\varphi)$. Njena nezavisna rešenja su $h_m(\varphi) = e^{\imath m\varphi}$, a uslov periodičnosti $h_m(0) = h_m(2\pi)$ pokazuje da m može biti samo ceo broj. U prostoru funkcija na kružnici $\mathcal{L}^2(\varphi)$, ovo je jedan bazis (ortonormiranost se postiže delenjem sa $\sqrt{2\pi}$), tj. $[\hat{l}_3]_\varphi$ je kompletna opservabla. To automatski znači da je u prostoru $\mathcal{H}_o$ angularni moment celobrojan (tj. u razlaganju $\mathcal{H}_o$ javljaju se samo ireducibilni potprostori $\mathcal{H}^{(k,\lambda)}$ sa celim k). Kako je faktor iz $\mathcal{L}^2(\theta)$ operatora $\hat{l}_3$ jedinični operator, Teorem T A.3.1.i) pokazuje da je svaka funkcija $\psi_m(\theta,\varphi) = g(\theta)h_m(\varphi)$ jedan svojstveni vektor ovog operatora za svojstvenu vrednost $m\hbar$. Stoga opservabla $\hat{l}_3$ nije kompletna, a faktor $g(\theta)$ određen je isključivo na osnovu svojstvenog problema $\hat{\mathbf{l}}^2$.

Izraz (A.3.5) pokazuje da svojstveni problem opservable $\hat{\mathbf{l}}^2$ može da se reši na osnovu Teorema T A.3.1.ii). Uzimajući $\hat{B}_2 = [\hat{l}_3]^2_\varphi$, a $\hat{C}_2 = I_\varphi$, nađeno rešenje za $[\hat{l}_z]_\varphi$ povlači da se za svako celobrojno $m \neq 0$ dobija prostor $\mathcal{L}^2(\theta) \otimes \mathcal{H}^{|m|}$, gde je $\mathcal{H}^{|m|}$ dvodimenzionalni potprostor obrazovan funkcijama $e^{\imath m\varphi}$ i $e^{-\imath m\varphi}$ (u oznakama teorema je $b^2 = |m|^2\hbar^2$, dok jedina svojstvena vrednost $c^2 = 1$ za I_φ nije naglašena). Tako se u ovom prostoru opservabla $\hat{\mathbf{l}}^2$ redukuje u

$$[\hat{\mathbf{l}}^2]_\theta^{(m)} = \frac{m^2\hbar^2}{\sin^2\theta} - \frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}).$$

Dakle, svojstvena jednačina $\hat{\mathbf{l}}^2\psi(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\psi(\theta,\varphi)$, svodi se na niz jednačina u prostorima $\mathcal{L}^2(\theta) \otimes \mathcal{H}^{|m|}$; nakon uvođenja promenljive $x = \cos\theta$ (time i $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}$) i jednostavnog sređivanja, to je niz uopštenih *hipergeometrijskih jednačina*:

$$(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{2x}{1-x^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{l(l+1)(1-x^2)-m^2}{(1-x^2)^2})g_l^m(x) = 0. \tag{A.3.6}$$

Jasno je da je svako rešenje za m istovremeno i rešenje za $-m$, a sam standardni postupak rešavanja uopštene hipergeometrijske jednačine[A.3.2] će biti sproveden za $m \geq 0$.

Uz oznake $\sigma(x) = 1-x^2$, $\tilde{\sigma}(x) = l(l+1)(1-x^2)-m^2$ i $\tilde{\tau}(x) = -2x$, prvo se određuje konstanta k tako da je izraz $\pi \overset{\mathrm{def}}{=} \frac{\sigma'-\tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{(\frac{\sigma'-\tilde{\tau}}{2})^2 - \tilde{\sigma} + k\sigma}$ polinom po x. Ovo znači da je potkoreni kvadratni trinom $m^2+(k-l(l+1))(1-x^2)$ zapravo kvadrat binoma, tj. izjednačavanje sa nulom diskriminante $4(m^2+k-l(l+1))(l(l+1)-k)$ daje jednačinu po k. Njena rešenja su $k = l(l+1)$ i $k = l(l+1)-m^2$, koja daju ukupno četiri mogućnosti za π: $\pi = \pm m$ i $\pi = \pm mx$. Sada se $g_l^m(x)$

[A.3.2] Videti npr. А. Ф. Никифоров, В. Б. Уваров, *Специальные Функции Математической Физики*, Москва, Наука, 1978.

traži u formi $\chi_l^m(x)y_l^m(x)$, gde funkcije χ zadovoljava diferencijalnu jednačinu $\frac{\chi'}{\chi}=\frac{\pi}{\sigma}$. Za različite izbore π lako se dobijaju rešenja (nezavisna od l) $\chi^m(x)=\sqrt{(\frac{1+x}{1-x})^{\pm m}}$ i $\chi^m(x)=\sqrt{(1-x^2)^{\mp m}}$. Zamenom u (A.3.6), nalazi se hipergeometrijska jednačina: $\sigma(x)\frac{\mathrm{d}^2y_l^m(x)}{\mathrm{d}x^2}+\tau(t)\frac{\mathrm{d}y_l^m(t)}{\mathrm{d}x}=\lambda y_l^m(t)$; ovde je $\lambda=-k-\pi'$, a $\tau=2\pi+\tilde{\tau}$. Za navedena različita rešenja po k nalazi se $\lambda=-l(l+1)$ i $\tau=2(\pm m-x)$, odnosno $\lambda=m(m\mp 1)-l(l+1)$ i $\tau=2(\pm m-1)x$. U nastavku se traže rešenja $\rho(x)$ Pearson-ove diferencijalne jednačine $(\sigma\rho)'=\tau\rho$, koja su na intervalu promene x ($[-1,1]$) pozitivna i ograničena. Ova jednačina se lako rešava, ali su rešenja ograničena za svako nenegativno m samo pri izboru $k=l(l+1)-m^2$ i $\pi=mx$, pa zato i $\lambda=m(m+1)-l(l+1)=-(l-m)(l+m+1)$; to su $\rho(x)=(1-x^2)^m$.

Množenje funkcijom $\rho(x)$, koja je na intervalu $(-1,1)$ pozitivna, omogućuje da se hipergeometrijska jednačina svode na oblik $\frac{1}{\rho(x)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sigma(x)\rho(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}y_l^m(x)=\lambda y_l^m(x)$. Jasno, to je svojstvena jednačina operatora $(1-x^2)^{-m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(1-x^2)^{m+1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, i to za navedenu svojstvenu vrednost λ. Za $m\neq 0$, dozvoljena rešenja se anuliraju u $x=\pm 1$ (da bi njihovi proizvodi sa $e^{\pm\imath\varphi}$ bili nezavisni od φ u $x=\pm 1$, i pripadali prostoru $\mathcal{L}^2(\Omega)$). Za operatore ovog tipa rešenja sa navedenim graničnim uslovima su poznata u opštem slučaju: spektar je $\{\lambda_n=n\tau'+\frac{n(n-1)}{2}\sigma''\mid n=0,1,\ldots\}$, nedegenerisan je i odgovarajuće svojstvene funkcije su polinomi, ortonormirani u $\mathcal{L}^2(x)$ sa težinom $\rho(x)$, zadati *Rodrigues-ovom formulom* $y_n(x)=\frac{B_n}{\rho(x)}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[\sigma^n(x)\rho(x)]$, gde je B_n konstanta normiranja.

U razmatranom slučaju je $\lambda_n=-n(n+2m+1)$, tako da se traženo λ nalazi za $n=l-m$, u formi *asociranog Legendre-ovog polinoma*

$$y_l^m=P_{l-m}^{(m,m)}=\frac{B_{l-m}}{(1-x^2)^m}\frac{\mathrm{d}^{l-m}}{\mathrm{d}x^{l-m}}(1-x^2)^l.$$

Zadatak A.3.3 Pokazati da je gornja formula ekvivalentna sa

$$y_l^m=B_{l-m}(1-x^2)^m\frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{\mathrm{d}x^{l+|m|}}(1-x^2)^l.$$

(Uputstvo: iskoristiti opažanje da se bez obzira na znak m moraju dobiti isti rezultati.)

Zadatak A.3.4 Pokazati da za $x=\pm 1$ (tj. za $\theta=0,\pi$) i $m>0$ funkcija $y_m^l(x)$ ima vrednost 0.

Iz uslova $n=l-m$, sledi da pri fiksiranom l i $0\leq m\leq l$ postoji tačno jedno rešenje, te su zajednički svojstveni potprostori za fiksirane l i m nedegenerisani. Sa druge strane, pri fiksiranom l dobijeni uslov $0\leq m\leq l$, uz podsećanje na činjenicu da rešenja ne zavise od znaka m, zapravo je ekvivalentan već ranije izvedenom svojstvu $m=0,\pm 1,\ldots,\pm l$ (za celobrojno l). Konačno, zadatak Z A.3.4 (za $m=0$ funkcija $h_m(\varphi)$ ne zavisi od φ) pokazuje da su sva dobijena ukupna rešenja $\psi_l^m(\theta,\varphi)=\chi_m(\cos\theta)y_l^m(\cos\theta)h_m(\varphi)$ iz prostora $\mathcal{L}^2(\Omega)$. Tako se u ugaonom faktor prostoru $\mathcal{L}^2(\Omega)$ prostora $\mathcal{H}_o$ *za svako* $l=0,1,2,\ldots$ *javlja tačno jedan ireducibilni potprostor orbitalnog angularnog momenta.* Celobrojnost reprezentacija je posledica *a priori* postavljenog iskustvenog zahteva da se vektori ne menjaju pri rotaciji za 2π. Konačno, normiranjem dobijenih rešenja $\psi_l^m(\theta,\varphi)$ nalazi se standardni bazis *sfernih harmonika* u $\mathcal{L}^2(\Omega)$

$$\boxed{Y_l^m(\theta,\varphi)=\frac{(-)^l}{2^l l!\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}e^{\imath m\varphi}\sin^m\theta\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}\cos^{l+m}\theta}\sin^l\theta},\quad l=0,1,2,\ldots;\ m=l,\ldots,-l. \tag{A.3.7}$$

A.4 Slaganje angularnih momenata

Prostor stanja realnih fizičkih sistema po pravilu je direktni proizvod više prostora, pri čemu je u svakom definisan angularni moment (npr. višečestični sistem sa orbitalnim angularnim momentima svake od čestica, ili orbitalni i spinski angularni moment jedne čestice). Sa grupno teorijskog stanovišta to znači da je u svakom faktor prostoru zadata reprezentacija grupe SU(2), te je i u ukupnom prostoru zadat direktni proizvod ovih reprezentacija. Drugim rečima i u ukupnom prostoru je definisan totalni angularni moment. Na osnovu faktor prostora se može odrediti struktura totalnog angularnog momenta, i odgovarajuća pravila se obično nazivaju slaganje angularnih momenata. Naravno, dovoljno je rešiti problem za dva prostora, jer se sukcesivnim slaganjem po dva angularna momenta, može naći rešenje i za više prostora (pri tome neki od rezultata, npr. veza standardnog bazisa u ukupnom i pojedinim prostorima, mogu zavisiti od redosleda slaganja). Ovaj problem će biti razmotren u nastavku odeljka.

A.4.1 Clebsch-Gordan-ove serije

Neka je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, pri čemu je u svakom od faktor prostora definisan angularni moment $\hat{\mathbf{K}}_i$, sa ireducibilnim potprostorima $\mathcal{H}_i^{(k_i,\lambda_{k_i})}$. U celom prostoru se može definisati trojka operatora

$$\boxed{\hat{\mathbf{K}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{K}}_1 \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{\mathbf{K}}_2}, \tag{A.4.1}$$

(što se skraćuje u još uvek dovoljno jasno $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{K}}_1 + \hat{\mathbf{K}}_2$). Kako svaka vektorska opservabla $\hat{\mathbf{K}}_i$ zadovoljava komutacione relacije (A.2.3), a pri tome je $[\, \hat{K}_{1i}, \hat{K}_{2j}\,] = 0$ za svako i i j, nije teško proveriti da je i $\hat{\mathbf{K}}$ vektorska opservabla angularnog momenta (tj. i ona zadovoljava (A.2.3)). Pošto je struktura angularnog momenta potpuno definisana određivanjem standardnog bazisa (iz njega je jasno koji su ireducibilni potprostori uključeni, koliko puta koji, a i poznate su matrice svih relevantnih operatora u ovom bazisu), osnovni problem je određivanje ovakvog bazisa u $\mathcal{H}$. Pri tome se smatra da su standardni bazisi $\{|\, k_i, m_i, \lambda_{k_i}\,\rangle\}$ poznati.

Prostor $\mathcal{H}$ se razlaže na ortogonalnu sumu $\mathcal{H} = \oplus_{k_1,k_2} \oplus_{\lambda_{k_1},\lambda_{k_2}} \mathcal{H}_1^{(k_1,\lambda_{k_1})} \otimes \mathcal{H}_2^{(k_2,\lambda_{k_2})}$. Svaki od faktor prostora u sabircima je ireducibilni invarijantni potprostor odgovarajućeg angularnog momenta, odakle se odmah zaključuje da su sabirci $\mathcal{H}_1^{(k_1,\lambda_{k_1})} \otimes \mathcal{H}_2^{(k_2,\lambda_{k_2})}$ invarijantni (ali ne nužno ireducibilni!) potprostori za $\hat{\mathbf{K}}$. Ukupan problem se tako svodi na razlaganje ovih potprostora na ireducibilne, te određivanje standardnih bazisa u njima. Dodatno, pošto su operatori angularnog momenta određeni kvantnim brojem k, tj. ne zavise od λ, dovoljno je rešiti problem razlaganja i standardnog bazisa u apstraktnom slučaju proizvoda prostora $\mathcal{V}^{(k_1)} \otimes \mathcal{V}^{(k_2)}$. Ekvivalentan problem, razlaganje direktnog proizvoda dve ireducibilne reprezentacije $\hat{D}^{(k_1)}$ i $\hat{D}^{(k_2)}$ grupe SU(2) na ireducibilne reprezentacije je u teoriji grupa poznat kao *Clebsch-Gordan-ovo razlaganje* (ili serija).

Za dalja razmatranja je važno odrediti dejstvo operatora $\hat{\mathbf{K}}$ na direktni proizvod standardnih bazisa $\{|\, k_i m_i\,\rangle \mid m_i = k_i, \dots, -k_i\}$ u prostorima $\mathcal{V}^{(k_i)}$ $(i = 1, 2)$. Taj bazis prostora $\mathcal{V}^{(k_1)} \otimes \mathcal{V}^{(k_2)}$ se naziva *nekorelisani bazis*, i za njegove vektore $|\, k_1 m_1; k_2 m_2\,\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\, k_1 m_1\,\rangle \otimes |\, k_2 m_2\,\rangle$ očigledno, na osnovu (A.4.1) važi:

$$\hat{K}_3 \,|\, k_1 m_1, k_2 m_2\,\rangle = (m_1 + m_2)\hbar \,|\, k_1 m_1, k_2 m_2\,\rangle, \tag{A.4.2a}$$

$$\hat{K}_{\pm} \mid k_1 m_1, k_2 m_2 \rangle = c^{\pm}_{m_1}(k_1) \mid k_1 m_1 \pm 1, k_2 m_2 \rangle + c^{\pm}_{m_2}(k_2) \mid k_1 m_1, k_2 m_2 \pm 1 \rangle \qquad \text{(A.4.2}b\text{)}$$

(uprediti sa (A.2.6)).

Najvažniji rezultat u ovom kontekstu je: *pri slaganju angularnih momenata k_1 i k_2 dobijaju se po jedanput svi angularni momenti $k = |k_1 - k_2|, |k_1 - k_2| + 1, \ldots, k_1 + k_2$.* Njegova precizna formulacija je

Teorem A.4.1 *Razlaganje prostora $\mathcal{V}^{(k_1)} \otimes \mathcal{V}^{(k_2)}$ na ireducibilne prostore operatora $\hat{\mathbf{K}}$ je $\mathcal{V}^{(k_1)} \otimes \mathcal{V}^{(k_2)} = \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \mathcal{V}^{(k)}$, tj. Clebsch-Gordan-ove serija ireducibilnih reprezentacija grupe* SU(2) *su*

$$\boxed{\hat{D}^{(k_1)} \otimes \hat{D}^{(k_2)} = \oplus_{k=|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} \hat{D}^{(k)}}. \qquad \text{(A.4.3)}$$

Dokaz: Jezikom teorije Lie-jevih algebri, rezultat sledi iz činjenice da je ireducibilna reprezentacija potpuno određena svojom maksimalnom težinom. Drugim rečima, pošto je na osnovu (A.4.2a) vektor $\mid k_1 m_1; k_2 m_2 \rangle$ svojstveni za $\hat{K}_3$, sa svojstvenom vrednošću $m_1 + m_2$, njegova najveća svojstvena vrednost je $k_1 + k_2$, i javlja se tačno jedanput (za vektor $\mid k_1 k_1 \rangle \otimes \mid k_2 k_2 \rangle$). Sledeća po veličini je svojstvena vrednost $k_1 + k_2 - 1$, koja je dvostruko degenerisana (vektori su $\mid k_1 k_1 \rangle \otimes \mid k_2, k_2 - 1 \rangle$ i $\mid k_1, k_1 - 1 \rangle \otimes \mid k_2 k_2 \rangle$), i tako dalje. To znači da je maksimalna svojstvena vrednost operatora $\hat{\mathbf{K}}^2$ upravo $k(k+1)\hbar^2$, za $k = k_1 + k_2$, i da odgovarajući ireducibilni potprostor za $\hat{\mathbf{K}}$ sadrži svojstvene vektore operatora $\hat{K}_3$ za svojstvene vrednosti $m\hbar$, gde je $m = k_1 + k_2, \ldots, -k_1 - k_2$. Da bi se našli ostali ireducibilni potprostori za $\hat{\mathbf{K}}$, treba naći ortokomplement nađenog prostora $\mathcal{V}^{(k_1+k_2)}$ u $\mathcal{V}^{(k_1)} \otimes \mathcal{V}^{(k_2)}$. Sada je jasno da je u ortokomplementu najveća svojstvena vrednost operatora $\hat{K}_3$ upravo $(k_1 + k_2 - 1)\hbar$, i da postoji tačno jedan svojstveni vektor koji joj odgovara, te se i ireducibilni potprostor $\mathcal{V}^{(k_1+k_2-1)}$ pojavljuje tačno jedanput. Postupak se ponavlja uz smanjivanje k za po jedan u svakom koraku, dok se ne iscrpi ceo prostor direktnog proizvoda, a to je kada je $k = |k_1 - k_2|$. *Q. E. D.*

Teorem T A.4.1 pokazuje da se sve ireducibilne reprezentacije grupe SU(2) mogu dobiti pri redukciji odgovarajućeg direktnog stepena reprezentacije $\hat{D}^{(\frac{1}{2})}$, pa se ova reprezentacija naziva fundamentalnom reprezentacijom. U stvari, ovaj iskaz se može pooštriti, uz korišćenje simetrizacije direktnog proizvoda reprezentacija.

Zadatak A.4.1 Odrediti višestrukosti d_k u razlaganju $\mathcal{V}^{(k_1)} \otimes \mathcal{V}^{(k_2)} \otimes \mathcal{V}^{(k_3)} = \oplus_{k=0,\frac{1}{2},\ldots} d_k \mathcal{V}^{(k)}$.

A.4.2 Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti

Na osnovu teorema A.4.1 jasno je da se u $\mathcal{V}^{(k_1)} \otimes \mathcal{V}^{(k_2)}$ može jednoznačno (do na fazni faktor) odrediti *standardni bazis* $\{\mid k_1 k_2 k m \rangle \mid k = |k_1 - k_2|, \ldots, k_1 + k_2;\ m = k, \ldots, -k\}$ (oznake k_1 i k_2 u vektoru samo naglašavaju da je to bazis direktnog proizvoda ireducibilnih prostora), u kome su operatori $\hat{\mathbf{K}}$ reprezentovani kvazidijagonalnim matricama, kao što je opisano u paragrafu § A.2.5. Skalarni proizvodi $(\, k_1 m_1; k_2 m_2 \mid km) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, k_1 m_1, k_2 m_2 \mid k_1 k_2 k m \rangle$ su *Clebsch-Gordan-ovi koeficijenti*, i čine matricu prelaska sa nekorelisanog u standardni bazis[A.4.1].

Clebsch-Gordan-ove koeficijente je kod svih kompaktnih grupa moguće računati metodom grupnih projektora (kao kod konačnih grupa, uz odgovarajuću primenu invarijantne integracije). Međutim, pokazuje se da je praktičnije računati Clebsch-Gordan-ove koeficijente korišćenjem

[A.4.1] Ovo je zapravo opšta definicija Clebsch-Gordan-ovih koeficijenata, primenljiva za ireducibilne reprezentacije bilo koje grupe.

algebre su(2). Dok je dejstvo operatora $\hat{\mathbf{K}}$ na nekorelisani bazis dato u (A.4.2), u standardnom bazisu važe standardne relacije:

$$\hat{K}_3 \mid k_1k_2km\,\rangle = m\hbar \mid k_1k_2km\,\rangle,\ \hat{K}_\pm \mid k_1k_2km\,\rangle = c^\pm_m(k) \mid k_1k_2km \pm 1\,\rangle. \tag{A.4.4}$$

Vektor $\mid k_1k_2km\,\rangle$ je svojstveni vektor operatora $K_3^{(k_1,k_2)}$ za svojstvenu vrednost m, pa je samim tim linearna kombinacija odgovarajućih nekorelisanih svojstvenih vektora iz (A.4.2) za $m_1+m_2 = m$:

$$\mid k_1k_2km\,\rangle = \sum_{m_1=-m_-}^{m_+} C^k_{m,m_1} \mid k_1m_1; k_2, m_2 = m - m_1\,\rangle. \tag{A.4.5}$$

Granice sume je lako izračunati: $m_+ = \min\{k_1, k_2 + m\}$ i $m_- = \min\{k_1, k_2 - m\}$. Jasno je da je C^k_{m,m_1} upravo Clebsch-Gordan-ov koeficijent $(\ k_1m_1; k_2, m - m_1 = m_2 \mid km)$, te se delujući operatorom $\hat{K}_+$ na obe strane gornje jednakosti, na osnovu (A.4.2) i (A.4.4) i poznatih veza među koeficijentima c^+_m i c^-_m, nalazi

$$c^+_m(k)C^k_{m+1,m_1} = c^+_{m-m_1}(k_2)C^k_{m,m_1} + c^-_{m_1}(k_1)C^k_{m,m_1-1}. \tag{A.4.6}$$

Dobijenom rekurentnom formulom najpre se koeficijenti C^k_{k,m_1}, a zatim i proizvoljni C^k_{m,m_1}, svode na $C^k_{k,k}$, koji se direktno računaju. Relativno dugačkim, mada ne i komplikovanim računanjem[A.4.2] nalazi se izraz (A.2.23).

Zadatak A.4.2 Na osnovu (A.4.2), (A.4.4) i (A.4.5) naći Clebsch-Gordan-ove koeficijente $(\ k_1m_1; k_2m_2 \mid |k_1 - k_2|m)$ i $(\ k_1m_1; k_2m_2 \mid k_1 + k_2m)$. Na osnovu ovoga izračunati sve koeficijente za $k_1 = k_2 = \frac{1}{2}$. Uz pomoć (A.4.6), izračunati Clebsch-Gordan-ove koeficijente za $k_1 = k_2 = 1$.

[A.4.2] Pored druge knjige navedene u A.2.4, iscrpni izvođenje Clebsch-Gordan-ovih koeficijenata i reliranih rezultata dato je u А. П. Юцис, А. А. Бандзайтис, *Теория Момента Количества Движения в Квантовой Механике*, Вильнюс, 1965.